



Universidade Estadual de Campinas  
Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação

Leonardo Macedo da Graça Medeiros de Queiroz

**Confiabilidade de Interconexões - Uma Abordagem sob o  
Método de Interface Difusa**

Leonardo Macedo da Graça Medeiros de Queiroz

**Confiabilidade de Interconexões - Uma Abordagem sob o  
Método de Interface Difusa**

Dissertação apresentada à Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação da Universidade Estadual de Campinas, como parte dos requisitos exigidos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica na Área de concentração Eletrônica, Microeletrônica e Optoeletrônica

Orientador: Roberto Lacerda de Orio

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À  
VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO DE-  
FENDIDA PELO ALUNO LEONARDO  
MACEDO DA GRAÇA MEDEIROS DE  
QUEIROZ E ORIENTADA PELO PROFES-  
SOR DOUTOR ROBERTO LACERDA DE  
ORIO

Ficha catalográfica  
Universidade Estadual de Campinas  
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura  
Rose Meire da Silva - CRB 8/5974

Q32c      Queiroz, Leonardo Macedo da Graça Medeiros de, 1989-  
Confiabilidade de interconexões - uma abordagem sob o método de interface difusa / Leonardo Macedo da Graça Medeiros de Queiroz. – Campinas, SP : [s.n.], 2017.

Orientador: Roberto Lacerda de Orio.  
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação.

1. Eletromigração. 2. Aparelho e materiais eletrônicos - Confiabilidade. 3. Aparelho e materiais eletrônicos - Simulação por computador. 4. Circuitos integrados - Integração em escala muito amplas - Defeitos. I. Orio, Roberto Lacerda de, 1981-. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

**Título em outro idioma:** Interconnect reliability - an approach under the diffuse interface method

**Palavras-chave em inglês:**

Electromigration

Electronic equipment and supplies - Reliability

Computer and electronic materials - Computer simulation

Integrated Circuits - Very large scale integration - Defects

**Área de concentração:** Eletrônica, Microeletrônica e Optoeletrônica

**Titulação:** Mestre em Engenharia Elétrica

**Banca examinadora:**

Roberto Lacerda de Orio [Orientador]

Leandro Tiago Manera

Lucas Petersen Barbosa Lima

**Data de defesa:** 07-04-2017

**Programa de Pós-Graduação:** Engenharia Elétrica

## **COMISSÃO JULGADORA – DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

**Candidato:** Leonardo Macedo da Graça Medeiros de Queiroz RA: 071493

**Data da Defesa:** 07/04/2017

**Título da Tese:** “Confiabilidade de interconexões – uma abordagem sob o método de interface difusa”.

Prof. Dr. Roberto Lacerda de Orio (Presidente, FEEC/UNICAMP)

Dr Lucas Petersen Barbosa Lima (Imec, Bélgica)

Prof. Dr. Leandro Tiago Manera (FEEC/UNICAMP)

A ata de defesa, com as respectivas assinaturas dos membros da Comissão Julgadora, encontra-se no processo de vida acadêmica do aluno.



Infelizmente, a maior parte dos jovens no Brasil não têm acesso a ensino básico e superior de qualidade. Em todos os momentos, a minha mãe e o meu pai tiveram como prioridade a minha formação, caráter e liberdades de escolha. Dedico essa pesquisa a Nádia Macedo da Graça e a Cid Medeiros Cavalcanti de Queiroz.

Meus avós sempre me serviram com as mais sublimes referências morais de bondade, humanidade, generosidade e amor ao próximo. Dedico essa pesquisa a Terezinha de Medeiros, Nadir Macedo da Graça, Edmundo Fernandes da Graça e a Ennio Alex Cavalcanti de Queiroz (*in memoriam*).

Dedico esse trabalho a Tainá Lopes. Se dispondo a noites mal dormidas, presenteou-me com uma carinhosa presença de grande valor para a redação dessa dissertação.

Agradeço ao professor Dr. Roberto Lacerda de Orio por tutelar minha imersão no ambiente acadêmico e científico, envolvendo-se nos aspectos teóricos, formais e burocráticos de tudo que foi produzido em meu nome nos últimos dois anos.

# **Resumo**

Criou-se métodos de modelagem e simulação referentes a três aspectos: os transportes de massa (eletromigração) - nas superfícies do material condutor e nos contornos da microestrutura policristalina, e as alterações de resistividade como efeito de espalhamento de elétrons.

A investigações foram teóricas, compondo-se de modelagens e simulações computacionais. O princípio do trabalho foi associar os modelos físicos usuais ao "método de simulação de interface difusa". Isto foi feito a partir da descrição da evolução de vazios de eletromigração.

Com estudos sobre o funcionamento do método de interface difusa em si, foram desenvolvidas abordagens metodológicas de estabilidade e fidedignidade adequadas à aplicação dos modelos físicos. O método de interface difusa mostrou-se de grande valor para contemplar todos os aspectos físicos relevantes, com grande potencial para inovações nas formas de se investigar a deterioração de interconexões em circuitos integrados.

As simulações realizadas utilizaram parâmetros físicos de ordens de grandeza realísticas, de forma que os resultados são compatíveis com os resultados experimentais da literatura. Foram concebidas simulações de deterioração de interconexões com uma completude e detalhamento que nenhum outro trabalho havia obtido até o presente momento. Os resultados indicam que alguns fenômenos físicos mudarão os paradigmas do transporte de corrente elétrica nas tecnologias de microeletrônica futuras.

O objetivo fundamental traçado foi atingido neste trabalho, uma vez que as simulações manifestaram consistentemente os conceitos reclamados, demonstrando que os métodos são capazes de acompanhar a evolução das interconexões do estado da arte.

# **Abstract**

Modeling and simulation methods were developed concerning three aspects: the mass transports (electromigration) - at the surfaces of the metal and at its poly-crystalline contours, and the resistivity disturbances as the effect of electron scattering.

The investigations were theoretical, consisting of modeling and simulations. The principle of the work is to attach the usual physical models to the "diffuse interface method of simulation". That was done based on the evolution of electromigration-induced voids.

By studying the diffuse interface method itself, deliberations are established on the stability and reality concerning the application of the physical models in the method. The diffuse interface method was shown to have great value accounting for all relevant physical aspects, with great potential for innovations on the means of investigating interconnect deterioration in integrated circuits.

The physical parameters used have realistic orders of magnitude, for the simulations manifested results compatible with experimental literature. The tool was developed in this work in such a way for the simulations to be liable of accounting for any specific cases of future state-of-the-art interconnects.

This work conceived simulations with a fullness and detailing that hasn't been obtained to this day. The results indicate that some physical phenomena will change the paradigms of electric current transport in the future microelectronics technologies.

# Lista de Figuras

1.1	Camadas de material dielétrico e interconexões. As regiões mais claras evidenciam os substratos metálicos. Ilustração de J. L. Killesse [8], reprodução autorizada pela autora. . . . .	21
1.2	Arranjo de interconexões e vias. Ilustração de J. L. Killesse [9], reprodução autorizada pela autora. . . . .	21
1.3	Da esquerda para a direita, de baixo para cima: interconexão-via-interconexão em arranjo típico presente nos circuitos integrados. Vazio de eletromigração na superfície da interconexão de cima. Crédito da imagem: [11]. . . . .	22
1.4	Estágio avançado da deterioração iniciada na configuração da Figura 1.3. Dois terços da região da interconexão que aparece na imagem está vazio de material condutor. Crédito da imagem: [11]. . . . .	22
1.5	Princípios de deterioração em diversos locais: na superfície da interconexão superior, no canto superior esquerdo da via e na interface entre a via e a interconexão inferior. Crédito da imagem: [12]. . . . .	23
1.6	Deterioração da interconexão na região sob a via. Crédito da imagem: [13]. . .	23
1.7	Região vazia de material condutor desenvolvendo-se na extremidade de menor potencial da linha. Crédito da imagem: [14]. . . . .	23
2.1	(a) Geometria usada nas simulações com indicações dos materiais considerados. (b) Visualização do plano y-z de seção transversal, com indicações das dimensões da estrutura simulada. . . . .	25
2.2	Pulso gaussiano definindo a posição da primeira (da esquerda para a direita) fronteira vertical da microestrutura. . . . .	31
2.3	Distribuição conforme eq. (2.12), com $X_{size0} = h_w$ e desvios padrão de $C_Y^V$ e $A_X$ nulos. . . . .	31
2.4	Função retangular usada para recortar as fronteiras verticais de acordo com as alturas dos grãos. . . . .	31
3.1	Geometria retangular com dois domínios (azul e vermelho) descritos implicitamente por um parâmetro espacial $\phi$ . Escala de cores indica a variação do parâmetro na interface difusa. . . . .	37
3.2	(a) Estado inicialmene agiado. (b) Fases azul e vermelha no instante de 3 s se separando desde o repouso. (c) Depois de 10 s, com grade de simulação exibida. . . . .	37

3.3	Parâmetro $\phi$ definindo metal, vazio e interface difusa na interconexão inferior. Barreira de difusão, via e material dielétrico não estão consideradas na escala de cores. . . . .	38
3.4	Parâmetro $\phi$ definindo metal, vazio e interface difusa na interconexão inferior. .	38
3.5	Visualização da eq. (3.13) aplicada ao hemisfério sul de uma circunferência descrita com interface difusa. (a) Componente $n_x(x,y)$ . (b) Componente $n_y(x,y)$ da direção normal à interface. . . . .	41
3.6	Distribuição espacial de $(h_w - y) interface$ , usada como definição da região mais baixa da interface. Como na Figura 3.5, uma semi-circunferência é novamente tomada como exemplo. . . . .	41
3.7	Convecção essencial da interface difusa. (a) Posição inicial. (b) Uma mudança sincronizada dos valores de $\phi$ tem o efeito de deslocar a interface para a direita.	42
3.8	Crescimento radial de uma semi-circunferência definida por $\phi$ . (b) Parâmetro de interface difusa perdendo a estabilidade por sair da região refinada de grade de simulação. . . . .	44
3.9	Deslocamento de uma circunferência definida por $\phi$ . (b)-(c) Distribuição anormal de $\phi$ por sair da região refinada de grade de simulação. . . . .	44
4.1	(a) Formato elipsóide em $t=0$ . (b) Interface se rearranja após 22000 horas de relaxamento. (c) Curvatura $\kappa$ da interface após 10000 horas. . . . .	46
4.2	Crescimento radial com velocidade concentrada na interface para comparação do gradiente de cores. (a) Com $\chi = \chi_1$ a região verde parece mais esticada. (b) Para $\chi = 100 \chi_1$ o gradiente de cores parece mais uniforme. . . . .	47
4.3	Variação do parâmetro $\epsilon$ pela eq. (3.25) garantiu a estabilidade da simulação em regiões de grade grosseira de elementos finitos. Nos dois casos foi usado $n_{in}=7$ .	48
4.4	Comparação da distribuição espacial de $\phi$ na interface demonstra o efeito de $\vec{u} shift$ . (a) Visualização aproximada da interface da Figura 4.2a. (b) Crescimento com redistribuição $shift$ da convecção. . . . .	49
4.5	(a) Distribuição de $\check{x}(x,y)$ . (b) Crescimento radial com mobilidade baixa e usando $\vec{u}$ mapeado simetricamente à interface. . . . .	49
4.6	Crescimentos radiais com a interface atingindo diferentes amplitudes finais. (a) $n_{in}=4$ . (b) $n_{in}=6$ . (c) $n_{in}=9$ . (d) $n_{in}=12$ . . . . .	50
4.7	Fidedignidade $f^f$ do deslocamento das interfaces tendendo a diferentes espessuras finais. (a) $n_{in}=4$ . (b) $n_{in}=6$ . (c) $n_{in}=9$ . (d) $n_{in}=12$ . . . . .	50
4.8	Fidedignidade da simulação com $shift \vec{u}$ , para $shift = 0,5 + \phi^2$ . . . . .	51
4.9	Distribuição de $\sqrt{n_x^2 + n_y^2} shift$ . A legenda de cores, com máximo pouco maior que 0,5, indica o dano na fidedignidade. . . . .	51
4.10	Evolução temporal do fator de compensação. . . . .	52

5.1	Densidade total de corrente em uma geometria com vazio na parte superior. A condutividade elétrica está acoplada à distribuição espacial de $\phi$ . . . . .	53
5.2	Fluxo total de vacâncias com as devidas difusividades atribuídas às superfícies do cobre. . . . .	55
5.3	Evolução da concentração de vacâncias, em $m^{-3}$ , devida aos fluxos nas superfícies. (a) Depois de 2700 horas. (b) Depois de 22000 horas. (c) Depois de 44000 horas de operação da interconexão. . . . .	55
5.4	Crescimento de vazio de eletromigração a partir de posição inicial debaixo da via. (a) Com 875 horas. (b) Com 2700 horas. (c) Com 10000 horas. (d) Com 15800 horas. (e) Com 19400 horas. (f) Com 25000 horas de operação da interconexão. . . . .	56
5.5	Crescimento a partir de posição inicial no canto superior direito. (a) Depois de 1000 horas. (b) Depois de 2700 horas. (c) Depois de 10000 horas. (d) Depois de 13800 horas. (e) Depois de 16600 horas. (f) Depois de 25000 horas de evolução temporal da equação de Cahn-Hilliard. . . . .	57
5.6	Crescimento a partir de posição inicial na superfície em contato com a capa. (a) Depois de 270 horas. (b) Depois de 1900 horas. (c) Depois de 5500 horas. Depois de 13800 horas de evolução temporal da eq. (3.1). . . . .	58
5.7	Crescimento a partir de posição inicial na transição entre a via e a interconexão de cima. (a) Em $t=0$ . (b) Depois de 50000 horas de operação das interconexões. . . . .	58
5.8	Vazio de eletromigração no canto superior esquerdo da interconexão de cima. . . . .	59
5.9	Deterioração da resistência em função do tempo de operação. (a) Vazio inicialmente embaixo da via. (b) Vazio inicialmente no canto superior direito. (c) Vazio inicialmente na transição via-interconexão. . . . .	60
5.10	Comportamento do tempo de falha em simulações de crescimento de vazio com o método de interface difusa. . . . .	61
5.11	Movimento de advecção: o vazio se desloca levemente no sentido da corrente e altera levemente seu formato. . . . .	61
5.12	Advecção em microestrutura tipo bambu. . . . .	62
5.13	"Microestrutura 1". (a) $G_x$ . (b) $G_y$ . . . . .	62
5.14	"Microestrutura 2". (a) $G_x$ . (b) $G_y$ . . . . .	63
5.15	"Microestrutura 3". (a) $G_x$ . (b) $G_y$ . . . . .	63
5.16	Fluxo total de vacâncias, em $10^4 m^{-2} s^{-1}$ . (a) Na microestrutura 1. (b) Na microestrutura 2. (c) Na microestrutura 3. . . . .	64
5.17	Concentrações de vacâncias, em $m^{-3}$ , durante operação do condutor com microestrutura 3. (a) Depois de 2700 horas. (b) Depois de 22000 horas. (c) Depois de 44000 horas. . . . .	65

5.18	Evolução de um vazio de eletromigração em interconexão com microestrutura	
1.	(a) Com 833 horas de crescimento. (b) Com 2500 horas de crescimento. (c) Com 5500 horas de crescimento. (d) Com 13800 horas de crescimento. . . . .	66
5.19	Evolução de um vazio de eletromigração em interconexão com microestrutura	
2.	(a) Com 833 horas de crescimento. (b) Com 2500 horas de crescimento. (c) Com 5500 horas de crescimento. (d) Com 13800 horas de crescimento. . . . .	66
5.20	Evolução de um vazio de eletromigração em interconexão com microestrutura	
3.	(a) Com 833 horas de crescimento. (b) Com 2500 horas de crescimento. (c) Com 5500 horas de crescimento. (d) Com 13800 horas de crescimento. . . . .	67
5.21	Regiões indicadas para aumento local de resistividade em função do espaço estreitado de condução. . . . .	68
5.22	Variável espacial $\rho$ , em $\Omega \cdot cm$ , depois de 13800 horas de crescimento do vazio com microestrutura 3. . . . .	68
5.23	$\rho/\rho_0$ na região de maior aumento da resistividade. . . . .	69



## Glossário

$AR$  Quociente entre a altura e a largura da interconexão. 33, 34

$A_X$  Função aleatória para comprimento dos grãos do cristal. 9, 30–33

$A_Y$  Função aleatória para altura dos grãos do cristal. 31–33

$C_X^H$  Função aleatória para a componente x das inclinações das fronteiras horizontais. 15, 32, 33, 63

$C_X^V$  Função aleatória para a componente x das inclinações das fronteiras verticais. 15, 32, 33, 63

$C_Y^H$  Função aleatória para a componente y das inclinações das fronteiras horizontais. 15, 32, 33, 63

$C_Y^V$  Função aleatória para a componente y das inclinações das fronteiras verticais. 9, 15, 31–33, 63

$C$  Parâmetro de espalhamento referente à geometria do condutor. 33, 34

$D_{s0}$  Coeficiente da difusão tangencial de átomos na interface. 28

$D_{self}^{Cu}$  Difusividade interna a um monocristal de cobre. 54, 64

$D_s$  Difusividade de átomos tangencial à interface. 28, 40

$D_{v0}$  Coeficiente de difusão de vacâncias na equação de Arrhenius. 27

$D_v^{TaN}$  Difusividade na superfície entre o cobre e a barreira de difusão. 54, 59

$D_v^{cap}$  Difusividade na superfície entre o cobre e a capa. 29, 54, 59, 64

$D_v^{g.b.}$  Difusividade nos contornos de grãos. 29, 63, 64

$D_v$  Difusividade de vacâncias. 27, 30, 54, 64

$G_x$  Distribuição espacial das componentes x das inclinações de todas as fronteiras. 11, 32, 62–64

$G_y$  Distribuição espacial das componentes y das inclinações de todas as fronteiras. 11, 32, 62–64

$L_0$  Constante para cálculo do comprimento do vale do vazio. 41

$L_{vlp}$  Comprimento associado à região de vale do vazio. 35, 41

$Q_s$  Energia de ativação relativa à quebra de ligações interatômicas dos átomos da interface. 28

$Q$  Energia de ativação relativa à quebra de ligações interatômicas no interior do condutor. 27

$R^{fitting}$  Parâmetro de refletividade das fronteiras de grãos da rede cristalina. 34

$S_0$  Coeficiente da equação do tempo de falha. 29

$TTF$  Tempo de falha da interconexão. 11, 29, 60, 61

$T$  Temperatura. 27, 28, 34, 54

$VL$  Fator de alarguecimento da gaussiana. 35, 41, 67

$V_{interface}$  Volume da interface difusa. 51

$V_{rmpi}$  Fator para normalização da integral na extrusão de pontos. 43

$V_{void}$  Volume do vazio. 39, 40

$W$  Densidade de energia de deformação. 28, 40

$X_{size0}$  Comprimento médio dos grãos do cristal. 9, 30–34, 62

$Y_{size0}$  Altura média dos grãos do cristal. 31–33, 62

$Z_a$  Número de valência efetiva do átomo. 28

$Z_v$  Número de valência efetiva da vacância. 27

$\Omega_a$  Volume atômico. 28, 40

$\Omega_v$  Volume de uma vacância. 28, 42

■ Conjunto de pontos da representação geométrica do metal da interconexão. 27, 30–32, 35, 39–41, 43, 45, 54, 64

$\check{x}$  Valor de  $x$  transformado por extrusão espacial. 10, 43, 49

$\check{y}$  Valor de  $y$  transformado por extrusão espacial. 43, 49

$\chi$  Mobilidade da interface. 10, 38–40, 47

$\coprod$  União disjunta de elementos no espaço.. 27, 54, 64

$\delta_s$  Espessura relativa à distância interplanar da rede cristalina. 28

$\epsilon$  Parâmetro de controle da espessura da interface. 10, 38–40, 43, 45, 47–50, 52, 63

$\gamma$  Energia de superfície. 28, 40

$\kappa$  Variável espacial de curvatura da interface. 10, 28, 40, 46

$\lambda^{(e-)}$  Caminho livre médio do elétron. 33–35

$\lambda$  Parâmetro associado à tensão superficial da interface. 38–40

$\mathbb{C}^{HX}$  Região do metal onde atribui-se o valor  $C_X^H$ . 32

$\mathbb{C}^{HY}$  Região do metal onde atribui-se o valor  $C_Y^H$ . 32

$\mathbb{C}^{VX}$  Região do metal onde atribui-se o valor  $C_X^V$ . 32

$\mathbb{C}^{VY}$  Região do metal onde atribui-se o valor  $C_Y^V$ . 32

$\mu_s$  Potencial químico da interface. 28, 38, 40, 50

$\nabla_s$  Gradiente calculado na direção tangencial à interface. 28

$\phi$  Parâmetro espacial de interface difusa. 9–11, 37–50, 52, 53, 57, 59, 68

$\rho_0$  Resistividade do metal sem efeito de espalhamento. 12, 33, 34, 68, 69

$\rho$  Resistividade do metal da interconexão com efeito de espalhamento. 12, 33–35, 68, 69

$\sigma_{Cu}^{(e-)}$  Condutividade do cobre. 39, 53

$\sigma_s$  Tensão superficial. 38–40

$\theta_{grain}$  Ângulo de inclinação da fronteira entre grãos. 30, 62

$\vec{E}_s$  Campo elétrico tangencial à interface. 28

$\vec{E}$  Campo elétrico. 27

$\vec{G}$  Vetor unitário na direção da fronteira entre grãos. 30

$\vec{J}_s$  Fluxo tangencial de átomos na interface. 28, 61

$\vec{J}_v$  Fluxo de vacâncias. 27, 28, 54, 55, 65, 67

$\vec{j}$  Densidade de corrente. 29, 53, 54, 60

$\vec{n}$  Vetor normal à interface. 28, 30, 40, 42

$\vec{u}$  Velocidade de convecção da interface. 10, 18, 38, 42, 43, 45, 46, 48–52, 57, 61, 65, 70

$a$  Fator de anisotropia da microestrutura. 18, 30, 62

*bulk* Variável espacial que define a região do substrato do condutor. 39, 42, 53

$c_v$  Concentração de vacâncias. 27, 28, 55, 64

$e$  Carga do elétron. 27, 28

$f^c$  Fator de compensação. 51, 52

$f^f$  Fator de fidedignidade. 10, 45, 50

$g$  Pulso gaussiano. 30–32, 35, 63

$h_{grid}^{mean}$  Média de tamanho dos elementos de grade dentro da interface. 45

$h_{grid}$  Variável espacial relativa ao tamanho do elemento da grade de simulação. 45

$h_w$  Altura da linha de interconexão. 9, 10, 31, 34, 35, 41, 53, 62, 69

*interface* Variável espacial que define a região da interface. 10, 39–43, 45, 51, 52

$k$  Constante de Boltzmann. 27, 28

$m$  Fator de amplificação anisotrópica da velocidade de convecção. 30, 62

$n_{in}$  Número de elementos finitos que se deseja ter dentro da interface, contados perpendicularmente ao gradiente de cores. 10, 45, 48–50

$n_x$  Componente x do vetor normal à interface. 10, 30, 40–42, 45, 46, 51

$n_y$  Componente y do vetor normal à interface. 10, 30, 40–42, 45, 46, 51

$n$  Parâmetro de ajuste experimental do modelo de tempo de falha. 29, 61

$p^{fitting}$  Parâmetro de especularidade das colisões dos elétrons com as superfícies do condutor. 33, 34

$rect_x$  Função retangular para recorte horizontal das fronteiras de grãos. 32

$rect_y$  Função retangular para recorte vertical das fronteiras de grãos. 9, 31, 32

*shift* Termo de correção da distribuição espacial da velocidade de convecção. 10, 17, 42, 43, 48–52, 70

$v_n$  Velocidade normal de deslocamento da interface. 28, 30, 42

*void* Variável espacial que define a região do vazio. 39, 40, 42

$w_w$  Largura (na direção z) da linha de interconexão. 33, 34, 53

$x_{vlp}$  Posição x da região mais baixa da interface. 35, 41

$x_{void}$  Posição x média do vazio. 35, 40

$y_{vlp}$  Posição y da região mais baixa da interface. 35, 41, 45, 52, 69

$y_{void}$  Posição y média do vazio. 40

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>19</b>
1.1	Interconexões em Circuitos Integrados (CIs)	19
1.2	Sobre esse trabalho	24
<b>2</b>	<b>Modelagem para interconexões</b>	<b>25</b>
2.1	A geometria usada no software	25
2.2	Adesão interatômica e transportes de massa	25
2.2.1	Das equações de transporte de massa à evolução do vazio	27
	Difusividade de vacâncias	27
	Concentração de vacâncias	28
	Fluxo tangencial de átomos na interface metal-vazio	28
	Movimento da interface do vazio	28
2.3	Falha da interconexão	29
2.4	Microestrutura cristalográfica	29
	Fator de amplificação da velocidade da interface	30
2.4.1	A Microestrutura Implícita Difusa	30
2.5	Efeitos de espalhamento de elétrons	33
	Alteração local de resistividade	34
2.6	Discussão	35
<b>3</b>	<b>O Método da Interface Difusa</b>	<b>37</b>
3.1	Relações espaciais na geometria	39
	Tensão superficial e mobilidade	40
	Vetor normal à interface	40
	O vale do vazio	41
3.1.1	Estabilidade do método	41
	Redistribuição espacial " <i>shift</i> " da velocidade de convecção	42
	Redistribuição espacial da velocidade de convecção por extrusão de pontos	43
	Controle de espessura da interface	43
	Espessura variável	44
3.1.2	Fidedignidade do método	45

<b>4</b>	<b>Fundamentos da simulação</b>	<b>46</b>
4.1	Mobilidade e relaxamento da curvatura . . . . .	46
4.2	Estabilidade da interface . . . . .	46
	Estabilidade versus mobilidade . . . . .	46
	Estabilidade versus grade de simulação . . . . .	47
	Redistribuição espacial de $\vec{u}$ . . . . .	48
4.3	Fidedignidade do deslocamento da interface . . . . .	49
4.4	Discussão . . . . .	52
<b>5</b>	<b>Evolução de vazios de eletromigração</b>	<b>53</b>
5.1	Parâmetros básicos da estrutura . . . . .	53
5.2	Fluxos de vacâncias nas superfícies . . . . .	54
	5.2.1 Evolução de vazios submetidos aos fluxos de superfície . . . . .	55
	Deterioração da resistência . . . . .	59
	5.2.2 Tempo de falha . . . . .	60
5.3	Movimento de advecção do vazio . . . . .	61
5.4	Adicionando as ponderações de microestrutura . . . . .	62
	5.4.1 Advecção com o fator $a$ . . . . .	62
	5.4.2 A microestrutura implícita difusa . . . . .	62
	Fluxos de vacância nos contornos de grãos . . . . .	63
5.5	Crescimento de vazios de eletromigração em condutores policristalinos . . . . .	65
5.6	Efeitos de espalhamento . . . . .	67
<b>6</b>	<b>Conclusão</b>	<b>70</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>72</b>
	<b>Apêndice: trabalho apresentado em congresso</b>	<b>78</b>
	Anexo . . . . .	79

## 1.1 Interconexões em Circuitos Integrados (CIs)

As análises que serão desenvolvidas nesse trabalho baseiam-se nas características das conexões elétricas em circuitos integrados. Nesse contexto, serão apresentados alguns fenômenos físicos potencialmente críticos para o escalamento das interconexões da microeletrônica. As ciências que estão relacionadas às interconexões têm importância que extrapola as aplicações tecnológicas atuais, as quais serão usadas aqui como objeto da pesquisa. Isso porque essa categoria de conhecimento sempre terá sua utilidade renovada pelas demandas de transmissão de corrente elétrica das tecnologias que estão por vir.

Quando alguma informação é submetida a qualquer conjunto de operações - transporte, interpretação, transformação, armazenamento etc. - cuja unidade semântica seja a propagação de corrente ou de campo elétrico, contempla-se a epistemologia de CI. Portanto, qualquer tecnologia que se produza dentro desse contexto estará condicionada, em algum nível, ao papel das interconexões.

Atualmente, a maior parte das tecnologias de processamento de dados usa as estruturas tipo MOS [1] para condicionar as combinações de corrente elétrica referentes às operações lógicas desejadas. Presentes em celulares, tablets e computadores, os CIs atuais são compostos com bilhões de transistores MOS fabricados por centímetro quadrado sobre o substrato de silício.

A invenção do transistor é creditada a J. E. Lilienfeld, que em 1928 submetera uma requisição de patente [2] caracterizando seu "Dispositivo de Controle de Corrente Elétrica"<sup>1</sup>. Trinta anos depois, J. Kilby patenteou o primeiro transistor plano [3] e um pouco mais tarde, em 1961, Fairchild [4] construiu o primeiro circuito integrado planar. A década de 1960 testemunhou um imenso avanço da tecnologia planar de fabricação de circuitos integrados. Em 1971 a *Intel*<sup>TM</sup> lançou o *Microprocessador4004*<sup>TM</sup>, com milhões de transistores por  $cm^2$ , em computadores com viabilidade industrial e comercial. No que se refere a quantidade de transistores por unidade de área, em 1965 Gordon Moore previu [5] que a densidade de dispositivos iria dobrar a cada dois anos aproximadamente, mantendo-se mesma ordem de grandeza nos custos de fabricação. Essa previsão é conhecida como "Lei de Moore", ela tem se concretizado até então (com pequenas modificações) e espera-se que essa tendência siga até o ano 2025 [6, 7].

---

<sup>1</sup>Tradução não oficial do título original da patente - "*Device for controlling electric current*".

As dopagens das ilhas de fonte e dreno, por exemplo, sujeitam a maneira clássica de fabricar transistores MOS às limitações de escalamento. Isso porque, entorno da junção da fonte ou do dreno com o substrato de Si, a largura da região de depleção impõe um mínimo para os comprimentos possíveis de canal, visto que a superposição das regiões de depleção das duas ilhas originaria um caminho de condução elétrica por baixo do canal. Além desta, outras premissas sobre o funcionamento dos transistores MOS estão vinculadas a fenômenos físicos que impedem a concepção, na forma como são feitos atualmente, desses dispositivos abaixo de certas dimensões. Infere-se daí que a continuação do escalamento necessariamente dependerá em algum momento de mudanças nos paradigmas de fabricação, o sensibilizaria cada vez mais os custos até um inevitável colapso da Lei de Moore.

À evolução da Lei de Moore associa-se o comprimento do canal dos transistores presentes nos CIs de cada estágio desse escalamento. Cada novo tamanho de transistor que se consegue fabricar determina uma nova etapa para a microeletrônica, chamada de "nó de tecnologia". Os nós de tecnologia são referidos pelo comprimento do canal do transistor de cada época: "nó de tecnologia de 50  $\mu\text{m}$ ", "nó de tecnologia de 20  $\mu\text{m}$ ", "nó de tecnologia de 16  $\mu\text{m}$ " etc. Quanto maior o número de transistores trabalhando em conjunto, maior a quantidade de operações paralelas e portanto maior a velocidade de processamento dos dados. Quanto menores os dispositivos, menores são os acúmulos de carga e então maior a velocidade das respostas capacitivas de carregamento e descarregamento. Portanto, o interesse no escalamento dos dispositivos é relacionado à velocidade de processamento. Atualmente já se produz em escala industrial circuitos integrados do nó de 14 nm [6].

A tecnologia planar de fabricação de CIs estrutura as interconexões em meio a diversas camadas de material isolante depositadas sobre a lâmina de silício. Entre adições consecutivas de isolante, por corrosão química de determinadas regiões fotossensibilizadas obtém-se um conjunto trincheiras em cada camada. As interconexões são formadas pelo(s) metal(ais) alocados nessas regiões de baixo relevo. A deposição de material condutor nas trincheiras é promovida separadamente em cada camada pela exposição desta a um ambiente com concentração controlada do metal na fase vapor.

As camadas de dielétrico são paralelas ao plano do circuito, de maneira que os sucessivos depósitos arranjam as interconexões em níveis contados perpendicularmente a partir do silício. A Figura 1.1 ilustra uma seção perpendicular às camadas e às trincheiras, de modo que as dimensões a mostra são a altura e a espessura das camadas.

Na Figura 1.1 observa-se que as regiões metálicas extrapolam os níveis, atravessando as camadas. Estas regiões, geralmente em formato de bico, são chamadas de "vias" e promovem comunicação elétrica entre interconexões de diferentes níveis.



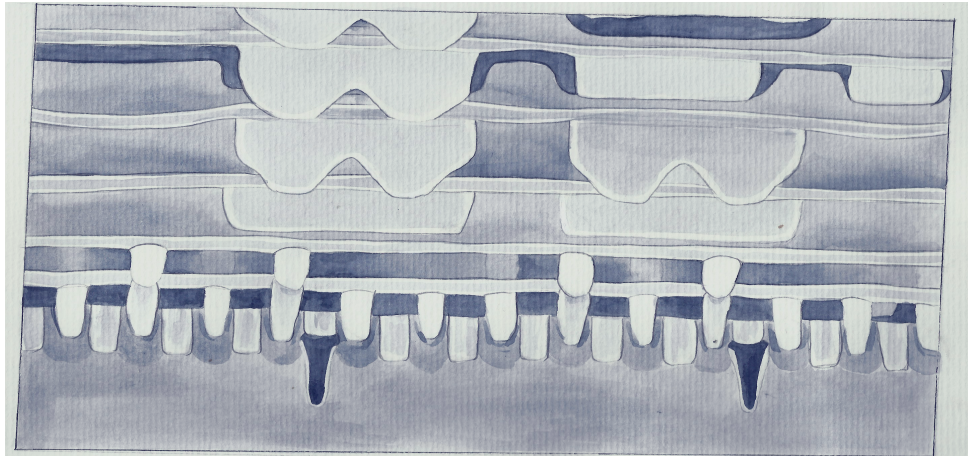


Figura 1.1: Camadas de material dielétrico e interconexões. As regiões mais claras evidenciam os substratos metálicos. Ilustração de J. L. Killesse [8], reprodução autorizada pela autora.

A Figura 1.2 possibilita uma visualização mais explícita do arranjo de interconexões e vias. Esta figura ignora a presença do dielétrico e nela é possível ver o comprimento das interconexões.

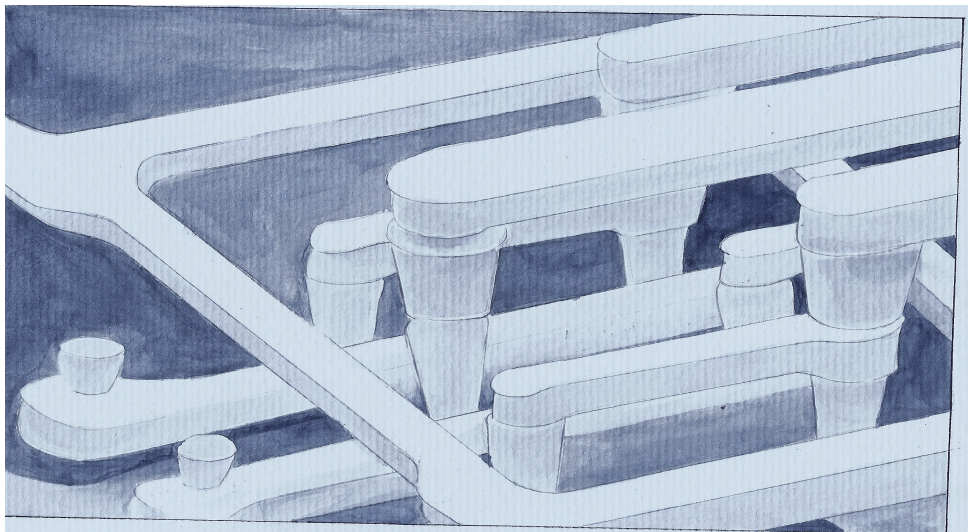


Figura 1.2: Arranjo de interconexões e vias. Ilustração de J. L. Killesse [9], reprodução autorizada pela autora.

Além do dielétrico e do metal, outros materiais são usados em determinadas regiões das camadas de interconexão. As interconexões e os materiais ao redor delas são fabricados no fim da linha de produção à qual a pastilha de silício é submetida. Por esse motivo o termo "BEOL" é usado para se referir a tudo que é construído acima do nível dos transistores<sup>2</sup>.

O BEOL é estruturado de forma que as interconexões façam a comunicação cabível entre os dispositivos, seja de sinal AC, de sinal DC ou de fornecimento de potência [1]. Portanto,

---

<sup>2</sup>Sigla do conceito em inglês "*Back-End-Of-Line*".

eventuais comprometimentos da condutividade das interconexões pode afetar a comunicação elétrica de bits entre os transistores.

Obviamente, o BEOL precisa acompanhar o escalamento dos CIs. As interconexões em CIs do nó de 45 nm têm seção transversal de aproximadamente 1600 nm x 800 nm nos níveis mais externos e 140 nm x 70 nm nos níveis mais internos. A tecnologia 7nm, por sua vez, demanda linhas de aproximadamente 250 nm x 125 nm nos níveis mais externos e 20 nm x 10 nm nos níveis mais próximos dos dispositivo [10]. À medida em que as interconexões diminuem, há intensificação dos efeitos de alguns fenômenos físicos na comunicação elétrica dos CIs. Essa pesquisa avalia a relação desses efeitos com as deteriorações observadas nas interconexões. As Figuras 1.3 a 1.7 são imagens reais de regiões deterioradas em interconexões.

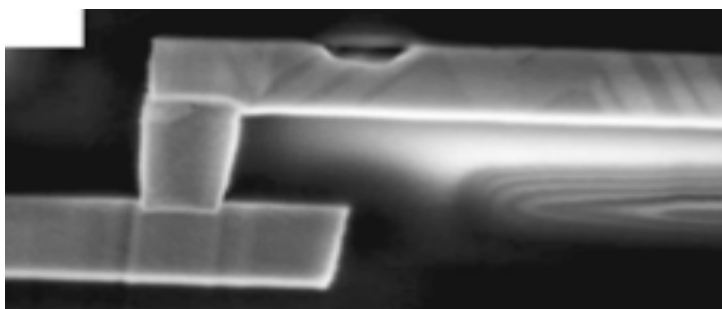


Figura 1.3: Da esquerda para a direita, de baixo para cima: interconexão-via-interconexão em arranjo típico presente nos circuitos integrados. Vazio de eletromigração na superfície da interconexão de cima. Crédito da imagem: [11].

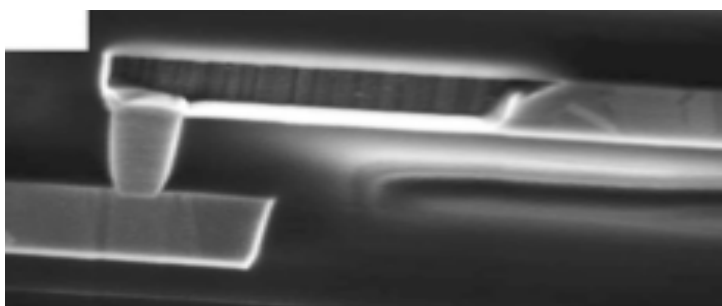


Figura 1.4: Estágio avançado da deterioração iniciada na configuração da Figura 1.3. Dois terços da região da interconexão que aparece na imagem está vazio de material condutor. Crédito da imagem: [11].

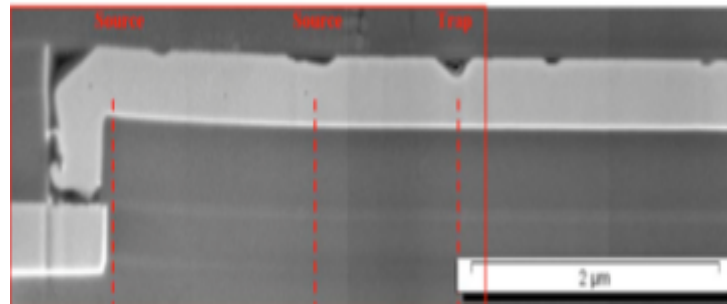


Figura 1.5: Princípios de deterioração em diversos locais: na superfície da interconexão superior, no canto superior esquerdo da via e na interface entre a via e a interconexão inferior. Crédito da imagem: [12].

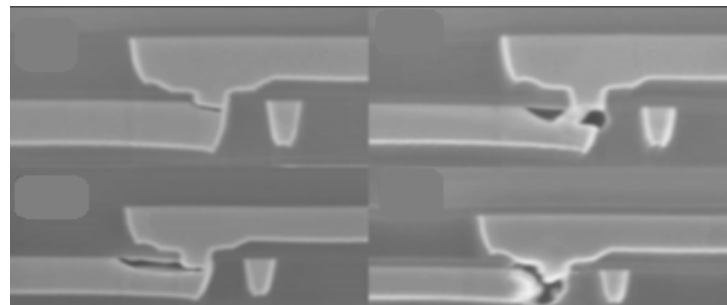


Figura 1.6: Deterioração da interconexão na região sob a via. Crédito da imagem: [13].

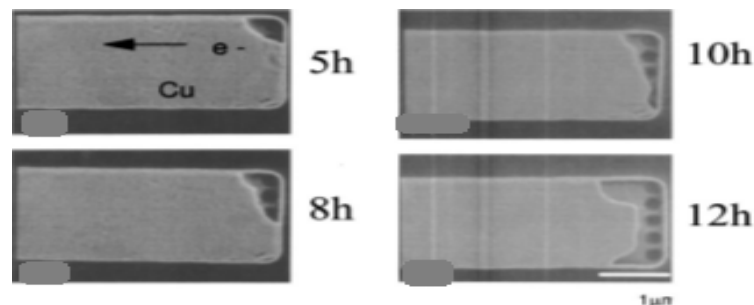


Figura 1.7: Região vazia de material condutor desenvolvendo-se na extremidade de menor potencial da linha. Crédito da imagem: [14].

As pesquisas em microeletrônica verificam extensamente as ocorrências de defeitos nas interconexões. Mesmo assim, nenhum estudo realizado até o presente momento descreve tais defeitos com a completude e o detalhamento que esse trabalho obteve. Os argumentos apresentados nos próximos capítulos reclamam que a completude e o detalhamento obtidos serão cruciais nas tecnologias futuras de microeletrônica.

A presença dos dispositivos de microeletrônica nas diversas áreas da sociedade tem uma relevância que transborda a necessidade de ser comentada aqui. Mesmo assim, é

válido ressaltar que, dado o tamanho dessa indústria os fatores que afetam a deterioração das interconexões têm uma importante repercussão mercadológica, ecológica e social [15–22].

## 1.2 Sobre esse trabalho

A pesquisa descrita nessa dissertação visa abordar os fenômenos pertinentes à deterioração de interconexões, analisando os efeitos dos fenômenos físicos que foram julgados pertinentes. As características físicas das interconexões do estado da arte motivaram o desenvolvimento de métodos novos de se avaliar transportes de massa e espalhamento de elétrons. Com isso estabeleceu-se um método completo e abrangente para simulação da evolução de vazios de eletromigração. Deliberou-se sobre a eficiência, a estabilidade e a fidedignidade das simulações, visando desenvolver uma ferramenta capaz de simular a deterioração por eletromigração sob quaisquer parâmetros de fabricação e operação. Os parágrafos a seguir distinguem o papel de cada capítulo na composição desse relatório.

O Capítulo 2 relata os aspectos físicos mais importantes para se considerar nas interconexões, baseando-se no estado da arte. Os transportes de massa no metal são chamados de eletromigração, e terão maior destaque nesse trabalho. Para isso, a estrutura policristalina do metal terá um papel importante. Ainda nesse capítulo é chamada a atenção para os efeitos de espalhamento dos elétrons da corrente - que podem afetar a resistividade do material condutor. Os modelos físicos usados são estabelecidos ao longo da discussão deste capítulo.

O Capítulo 3 descreve o "método de interface difusa", com os modelos e as metodologias desenvolvidas.

Existem diversas adaptações e considerações importantes sobre o método de interface difusa para simulação de vazios de eletromigração. Por isso, o Capítulo 4 expõe separadamente os resultados iniciais que competem ao método em si, à estabilidade e à fidedignidade das simulações.

O Capítulo 5 concentra os resultados finais das simulações de deterioração de interconexões. Para melhor aproveitamento da resolução das imagens (tendo em vista a escala de cores na análise dos resultados), neste capítulo as figuras estão consideravelmente maiores.

O último capítulo expõe o que se conclui das investigações do trabalho. Algumas deliberações mais específicas são confrontadas antes, ao longo do texto dos capítulos anteriores. Julgou-se ser essa a forma mais inteligível de se apresentar esse trabalho.

### 2.1 A geometria usada no software

A Figura 2.1 mostra a geometria usada nas simulações. Ela remete ao recorte de um arranjo típico interconexão-via-interconexão (de baixo para cima, da esquerda para a direita). Geometrias como esta estão exibidas ao longo desse trabalho sempre orientadas de forma que a direção  $\hat{x}$  é horizontal em relação ao plano do texto e a direção  $\hat{y}$  é paralela à página e perpendicular às linhas do texto.

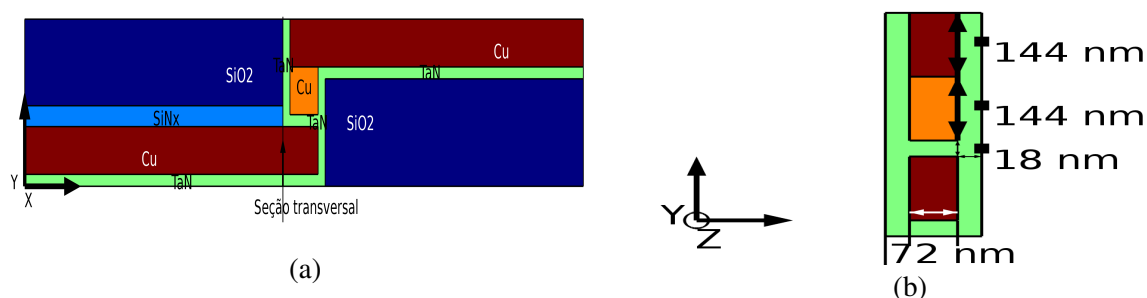


Figura 2.1: (a) Geometria usada nas simulações com indicações dos materiais considerados. (b) Visualização do plano y-z de seção transversal, com indicações das dimensões da estrutura simulada.

### 2.2 Adesão interatômica e transportes de massa

O termo "eletromigração" abrange determinados fenômenos de deslocamento de massa em materiais condutores de estrutura atômica ou molecular cristalina [23]. O conceito de eletromigração circunscreve a categoria de transportes de massa induzidos por campo elétrico. Os átomos podem absorver energia cinética das colisões com elétrons condutores - por repulsão coulombiana entre estes e as camadas eletrônicas mais internas. Como consequência, o(s) núcleo(s) pode(m) ser deslocado(s) de sua posição, deixando desocupado seu sítio original da rede de Bravais [24].

Um átomo/molécula de uma estrutura cristalina podem ser arrancado(a) de seu sítio quando sujeitos a eletromigração, além de agitação térmica ou gradiente de estresse. Independente de como foi formado, qualquer defeito pontual de sítio vazio é referido pelo nome "vacância". Por rompimentos e recombinações das ligações covalentes, um(a) átomo/molécula pode passar a ocupar a posição de uma vacância vizinha, tornando vacância seu sítio de origem. Assim, em efeito, as vacâncias migram ao longo do condutor. Eventualmente, as vacâncias se agrupam, formando um espaço **vazio** cada vez maior à medida em que neste mais vacâncias são

agrupadas.

As interconexões eram fabricadas com alumínio [25] até aproximadamente 15 anos atrás, quando começaram a ser feitas com cobre por sua maior condutividade elétrica - para o cobre  $\sigma = 5,9610^7 S/m$  [26], enquanto para o alumínio  $\sigma = 3,5010^7 S/m$  [27]. A vantagem mais significativa foi, entretanto, a maior confiabilidade em relação à eletromigração - o cobre possui maior temperatura de fusão - 1357,77 K do cobre e 933,47 K do alumínio [28] - e portanto menor difusividade de vacâncias. Apesar disso, defeitos causados por estresse mecânico passam a ser mais relevantes [29, 30], já que o cobre é mais rígido do que o alumínio - por ter maior módulo de elasticidade (117 GPa para o cobre e 69 GPa para o alumínio [31]), as dilatações do metal nos recozimentos, por exemplo, podem ser problemáticas [32, 33].

O cobre se difunde mais rapidamente para dentro do silício ou do óxido isolante [34]. Por isso, outra desvantagem da metalização por cobre é que será sempre necessário envolvê-lo com um material que componha o que é conhecido como "barreira de difusão"<sup>1</sup> [35]. Os materiais mais comumente usados como barreira de difusão são o tântalo ou seu nitreto [36], ou ainda o nitreto de titânio.

A eletromigração em filmes de Cu difere do alumínio no que diz respeito a qual o mecanismo dominante de transferência de massa. Em relação ao cobre, no alumínio há uma maior difusão de vacâncias no interior do metal. Em comparação às migrações internas, para o cobre em condições operacionais típicas o transporte de massa se dá majoritariamente nas superfícies do condutor [34, 37–39].

Nas superfícies do metal, os átomos no plano cristalino mais externo estão ligados perfeitamente com os átomos do plano imediatamente anterior. Mais externamente, entretanto, a qualidade da estatística das ligação desses átomos dependerá da adesão com o material adjacente. Uma pior adesão significa, em nível interatômico, maior quantidade de átomos da superfície não ligados com os átomos do material adjacente. Portanto, nas superfícies do condutor os átomos tem maior mobilidade, de forma que as vacâncias ali se deslocam - paralelamente ao filme condutor - com facilidade.

Relativamente às interconexões de alumínio, o cobre possui pior adesão com o material sobre a linha. Se a barreira de difusão for de algum material metálico, como geralmente é, ela terá boa adesão com a superfície do cobre [14, 34]. Entretanto, por causa do polimento químico-mecânico (uma das etapas do processo de fabricação) não é possível proteger com a barreira de difusão a superfície superior do filme de cobre, a qual é então coberta com uma capa que geralmente é de material dielétrico [38]. As ligações interatômicas entre cobre e óxido são mais fracas, então a adesão da capa é pior em relação às superfícies em contato com a barreira de difusão [38]. Por isso, é ao longo da superfície superior o caminho mais rápido de difusão de vacâncias.

Quantidades muito pequenas de oxidação do cobre podem reduzir drasticamente a

---

<sup>1</sup>Tal conceito refere-se ao impedimento da migração dos átomos de cobre para os materiais vizinhos. Não confundir com o termo "difusão" quando relativo à migração de vacâncias dentro do próprio metal.

adesão da capa na superfície da linha [34]. Por isso a degradação de interconexões é altamente sensível à contaminação por oxigênio.

### 2.2.1 Das equações de transporte de massa à evolução do vazio

Podemos calcular o fluxo  $\vec{J}_v$  de vacâncias por

$$\vec{J}_v = D_v \frac{Z_v e}{kT} c_v \vec{E} , \quad (2.1)$$

onde  $c_v$  é variável espacial da concentração de vacâncias e  $D_v$  é um coeficiente de difusividade. O fator  $Z_v$  é o módulo da valência efetiva da vacância,  $k$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura,  $e$  é a carga eletrônica e  $\vec{E}$  é o campo elétrico.

Além do campo elétrico, outras interações físicas estão envolvidas no movimento das vacâncias: os gradientes de concentração de vacâncias, de estresse hidrostático e de temperatura [40]. A intensidade destas interações é expressivamente menor do que a manifestação do campo elétrico na expressão 2.1, sendo este modelo suficiente para uma descrição de  $\vec{J}_v$  que atenda os propósitos desse trabalho.

#### DIFUSIVIDADE DE VACÂNCIAS

O coeficiente  $D_v$ , de difusão de vacâncias no metal, tem a forma de Arrhenius [41] -

$$D_v = D_{v0} \exp\left(\frac{-Q}{kT}\right) , \quad (2.2)$$

onde  $Q$  é a energia de ativação relativa ao deslocamento de átomos, isto é, a energia associada às quebras e recombinações das ligações interatômicas. A simulação de  $\vec{J}_v$  deve avaliar a migração de vacâncias em diferentes partes da estrutura da interconexão. Para isso, serão levadas em consideração as adesões interatômicas na superfície Cu-capas, nas superfícies Cu-TaN e nas fronteiras entre grãos, separadamente. Seja  $\blacksquare$  o conjunto de pontos da interconexão, será denotado  $\blacksquare D_i$  a região dos pontos onde se atribui difusividade  $D_i$ , ou seja

$$\blacksquare D_i \equiv \blacksquare \hookrightarrow \{D_v | D_v = D_i\} . \quad (2.3)$$

Valores distintos para difusividade de vacâncias serão atribuídos separadamente aos determinados subespaços de  $\blacksquare$ , de modo que a união disjunta

$$\bigsqcup_{\blacksquare}^i \blacksquare D_i \equiv \blacksquare D_1 \oplus \blacksquare D_2 \oplus \blacksquare D_3 \oplus \dots \quad (2.4)$$

dessas regiões define a distribuição espacial de  $D_v$ , traduzindo o modo em que as difusividades são aplicadas na geometria da simulação.

### CONCENTRAÇÃO DE VACÂNCIAS

Monitora-se espacialmente a concentração das vacâncias,  $c_v$ , através da equação de continuidade

$$\frac{\partial c_v}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_v , \quad (2.5)$$

que por conservação de massa induzirá localmente acumulação ou depleção de vacâncias.

### FLUXO TANGENCIAL DE ÁTOMOS NA INTERFACE METAL-VAZIO

As previsões acerca da evolução do vazio devem ainda levar em consideração a migração de átomos ao longo da interface metal-vazio, o que também ocorre porque os átomos absorvem momento dos elétrons da corrente. Os deslocamentos de átomos tangencialmente à interface fazem com que o vazio mude de formato. A partir daqui esse efeito será chamado de "advecção". A este tipo de migração atribui-se um fluxo de átomos tangencial à interface,  $\vec{J}_s$ , tal que [42]

$$\vec{J}_s = -\frac{D_s \delta_s}{kT} (\nabla_s \mu_s - |Z_a| e \vec{E}_s) , \quad (2.6)$$

com a difusividade de átomos também estimada [41] pela forma

$$D_s = D_{s0} \exp\left(\frac{-Q_s}{kT}\right) , \quad (2.7)$$

onde  $Q_s$  é a energia de ativação referente às ligações covalentes dos átomos no(s) último(s) plano(s) da interface metal-vazio com cada átomo do(s) plano(s) imediatamente anterior(es). Ademais,  $Z_a$  é a valência efetiva dos átomos no condutor,  $\vec{E}_s$  é a projeção do campo elétrico na direção tangencial à superfície e  $\delta_s$  é um valor relacionado à espessura da interface.<sup>2</sup>

O primeiro termo dentro do parênteses da eq. (2.6) refere-se ao potencial químico da superfície, definido fisicamente por

$$\mu_s = \Omega_a (W - \gamma \kappa) , \quad (2.8)$$

que é proporcional ao volume atômico  $\Omega_a$  do metal e depende da densidade de energia de deformação  $W$ , da energia de superfície  $\gamma$  e da curvatura  $\kappa$  da mesma.

### MOVIMENTO DA INTERFACE DO VAZIO

Os fluxos  $\vec{J}_s$  e  $\vec{J}_v$  afetam o formato e o tamanho do vazio, provocando deslocamento normal da interface do metal-vazio com velocidade

$$v_n = -\nabla_s \cdot \vec{J}_s - \Omega_v \vec{J}_v \cdot \vec{n} , \quad (2.9)$$

onde  $\Omega_v$  é o volume da vacância, usualmente tomado como sendo  $0,4\Omega_a$  [43]. O primeiro termo da eq. (2.9) leva em conta que as variações no fluxo tangencial à interface geram acúmulo

---

<sup>2</sup>A espessura  $\delta_s$  não tem necessariamente relação com a espessura definida pelo método da interface difusa (Capítulo 3), mas sim com a distância interplanar da rede cristalina do material.



perpendicular de átomos. O segundo termo da eq. (2.9) desloca a interface de acordo com a direção em que as vacâncias entram no vazio, fazendo o mesmo crescer.

## 2.3 Falha da interconexão

Naturalmente, o crescimento de um vazio aumenta a resistência da interconexão. Tipicamente, considera-se que um aumento de 10% é suficiente para comprometer fatalmente o funcionamento do CI [11,13,40,44,45]. Nesse caso define-se o "tempo de falha" da interconexão, *TTF*, como sendo o tempo de operação do condutor até que um vazio se forme e cresça de modo que a resistência se deteriore a 110% do seu valor original<sup>3</sup>.

Na indústria da microeletrônica, os setores responsáveis pela confiabilidade dos dispositivos costumam ajustar com funções potenciais o comportamento da degradação da resistência. A densidade de corrente na interconexão,  $\vec{j}$ , afeta o tempo de falha. Das observações experimentais de tal relação inferiu-se o modelo empírico

$$TTF = S_0 |\vec{j}|^{-n} , \quad (2.10)$$

onde  $n$  é um parâmetro de ajuste que varia entre 1 e 2 [40].

## 2.4 Microestrutura cristalográfica

A deterioração das interconexões atuais está intimamente ligada com as propriedades da capa [14,35,38,46]. No que diz respeito aos fenômenos de eletromigração, é importante entender que os transportes de massa se dão principalmente na superfície de cima do condutor e, em menor intensidade, nas fronteiras entre os grãos do cristal. A adesão da superfície metal-capa costuma ser mais fraca relativamente à adesão entre as fronteiras dos grãos. Por isso, até hoje poucos artigos consideram relevante a difusão de vacâncias nos contornos dos grãos [37–39].

O tamanho médio dos grãos e as orientações (inclinações) das fronteiras depende dos processos de fabricação [29,47] - dos parâmetros de deposição do metal e dos tratamentos térmicos aos quais o mesmo é submetido. A princípio, a influência mais amplamente considerada da microestrutura cristalográfica é sua relação com as propriedades elásticas e de estresse do condutor [12,29,30,32,33].

Novas tecnologias de fabricação devem usar capas cada vez mais eficientes em relação à aderência com o metal e portanto à difusão de vacâncias na superfície. Alguns trabalhos indicam diminuição da difusão de vacâncias em superfícies de cobre cobertas com capas de CoWP [46], por exemplo, aumentando a relação  $D_v^{g.b.}/D_v^{cap}$  e tornando mais relevante a eletromigração na região interna do condutor. De fato, medidas experimentais em interconexões abaixo de 90 nm de espessura apresentam menor energia de ativação no interior do metal, o que é atribuído a uma maior contribuição dos transportes de massa ao longo dos contornos de grãos [12,29,34,46–48].

---

<sup>3</sup>"Time-To-Failure"

O fluxo de vacâncias é muitas ordens de grandeza menor dentro do cristal do condutor em relação à superfície superior da interconexão, sendo  $D_v$  no interior de um grão de cobre  $10^{-5}$  vezes menor do que em uma superfície Cu-SiNx [12], por exemplo. Todavia, em relação a difusividade tangencial de vacâncias nas fronteiras entre grãos, a diferença para a difusividade sob a capa geralmente não excede uma ordem de grandeza [34, 46] (dependendo da capa). O fluxo de vacâncias no interior do condutor deve depender, portanto, principalmente da microestrutura [47].

#### FATOR DE AMPLIFICAÇÃO DA VELOCIDADE DA INTERFACE

Para aplicar o efeito da microestrutura na evolução dos vazios de eletromigração, uma primeira abordagem [23] seria multiplicar a velocidade de deslocamento da interface por um termo como<sup>4</sup>

$$a = 1 + m(\vec{n} \cdot \vec{G}) = 1 + m[ n_x \cos(\theta_{grain}) + n_y \sin(\theta_{grain}) ] , \quad (2.11)$$

que amplifique na direção da fronteira entre grãos. Nesta equação,  $\vec{G}$  é a direção de orientação dos contornos dos grãos (inclinação  $\theta_{grain}$ ) e  $\vec{n}$  é a direção normal à interface do vazio. Multiplicado em  $v_n$ , o fator "a" amplifica "m" vezes a velocidade na direção tangencial à fronteira do grão.

### 2.4.1 A Microestrutura Implícita Difusa

O mais fisicamente correto é avaliar o efeito da microestrutura diretamente da configuração de fluxos nos contornos policristalinos. A maneira mais óbvia de fazer isso seria desenhar a microestrutura explicitamente na geometria do software. Ao invés disso, foi criada uma maneira mais efetiva de aplicar o arranjo policristalino no corpo da interconexão. A distribuição dos grãos dentro do condutor é aleatória. Para indicar as fronteiras entre os grãos, estas serão separadamente referidas por "aproximadamente verticais" ou "aproximadamente horizontais".

Seja  $g$  uma função gaussiana centrada em zero e  $A_X$  uma função aleatória com valor médio igual ao comprimento médio de um grão,  $X_{size0}$ , com  $\blacksquare \cdot g(x - A_X)$  obtém-se a região da primeira fronteira (da esquerda pra direita) entre grãos. Na interconexão inferior da Figura 2.2 está indicada, em vermelho, a distribuição gaussiana  $g(x - A_X)$ , que define a região de uma fronteira vertical entre grãos.

---

<sup>4</sup>Equação considerando duas dimensões.



Figura 2.2: Pulso gaussiano definindo a posição da primeira (da esquerda para a direita) fronteira vertical da microestrutura.

Com outra função aleatória  $C_Y^V$ , que varia de 0 a 1, calcula-se a componente  $y$  da angulação das fronteiras aproximadamente verticais. Então vários pulsos gaussianos são somados, sorteando as posições e cada componente  $y$  das inclinações por

$$\blacksquare \sum_{j=1}^n C_Y^V(j) g\left(x - \sum_{i=1}^j A_X(i)\right). \quad (2.12)$$

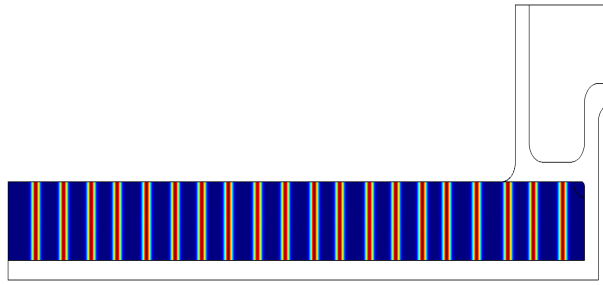


Figura 2.3: Distribuição conforme eq. (2.12), com  $X_{size0} = h_w$  e desvios padrão de  $C_Y^V$  e  $A_X$  nulos.

Define-se uma função retangular  $rect_y(y)$  como na Figura 2.4, com largura igual à altura média (na direção  $y$ ) dos grãos,  $Y_{size0}$ .

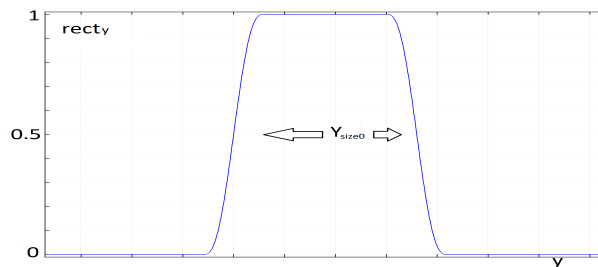


Figura 2.4: Função retangular usada para recortar as fronteiras verticais de acordo com as alturas dos grãos.

Essa função é usada para anular parte dos pulsos gaussianos. Seja  $A_Y$  uma função aleatória para a altura dos grãos, multiplicando nas gaussianas termos na forma

$$rect_y\left(\frac{Y_{size0}}{A_Y} y\right), \quad (2.13)$$

é possível recortar as fronteiras aproximadamente verticais de acordo com a altura aleatória  $A_Y$  de cada grão, para depois somar as fileiras horizontais de fronteiras verticais.

Seguindo esse raciocínio, distribui-se sequências de fileiras aproximadamente verticais - em regiões geradas por  $\blacksquare \cdot g$  localizadas aleatoriamente e acopladas a valores aleatórios de inclinação. O conjunto  $\mathbb{C}^{VY}$  é composto pelos pontos aos quais se associam componentes verticais de inclinação geradas por  $C_Y^V$ , isto é

$$\mathbb{C}^{VY} \equiv \blacksquare \cdot \sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^n \text{rect}_y \left( \frac{Y_{size0}}{A_Y(j,k)} \left[ y - \sum_{l=1}^k A_Y(j,l) \right] \right) C_Y^V(j,k) g \left( x - \sum_{i=1}^j A_X(i,k) \right) \quad (2.14)$$

Analogamente, com

$$\mathbb{C}^{HY} \equiv \blacksquare \cdot \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^m \text{rect}_x \left( \frac{X_{size0}}{A_X(j,k)} \left[ x - \sum_{l=1}^k A_X(j,l) \right] \right) C_Y^H(j,k) g \left( y - \sum_{i=1}^j A_Y(i,k) \right) \quad (2.15)$$

gera-se as fronteiras aproximadamente horizontais de todos os contornos com as componentes  $y$ ,  $C_Y^H$ , de suas inclinações. Naturalmente,  $C_Y^H$  deve ser uma função aleatória mais concentrada em torno de zero.

Do mesmo método definiu-se ainda os conjuntos

$$\mathbb{C}^{VX} \equiv \blacksquare \cdot \sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^n \text{rect}_y \left( \frac{Y_{size0}}{A_Y(j,k)} \left[ y - \sum_{l=1}^k A_Y(j,l) \right] \right) C_X^V(j,k) g \left( x - \sum_{i=1}^j A_X(i,k) \right) \quad (2.16)$$

e

$$\mathbb{C}^{HX} \equiv \blacksquare \cdot \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^m \text{rect}_x \left( \frac{X_{size0}}{A_X(j,k)} \left[ x - \sum_{l=1}^k A_X(j,l) \right] \right) C_X^H(j,k) g \left( y - \sum_{i=1}^j A_Y(i,k) \right) \quad (2.17)$$

para as componentes  $x$ ,  $C_X^V$  e  $C_X^H$ , das inclinações das fronteiras verticais e horizontais, respectivamente.

Agora basta aplicar as distribuições

$$G_x \equiv \mathbb{C}^{HX} \cup \mathbb{C}^{VX} \quad (2.18)$$

para atribuir à geometria todas as componentes horizontais e

$$G_y \equiv \mathbb{C}^{HY} \cup \mathbb{C}^{VY} \quad (2.19)$$

para atribuir todas as componentes verticais dos contornos da microestrutura.

Os grãos do metal dispõem-se aleatoriamente dentro das trincheiras gravadas nas camadas de óxido. A configuração que os grãos adquirem depende da geometria da interconexão,

do material e dos processos de fabricação. Dito isso, é possível afirmar que o conjunto de eqs. (2.14) - (2.17) é capaz de simular interconexões de qualquer nó de tecnologia, bastando alterar os parâmetros  $X_{size0}$ ,  $Y_{size0}$  e os desvios padrões das funções aleatórias  $C_{X,Y}^{V,H}$  e  $A_{X,Y}$ .

## 2.5 Efeitos de espalhamento de elétrons

À medida que entramos nos nós de tecnologia sub-20 nm, as colisões dos elétrons da corrente nas superfícies e nas fronteiras de grãos aumentam significativamente a resistividade das interconexões [10, 49–54].

As bandas de potencial elétrico nos cristais são formadas pelas superposições das funções de onda dos elétrons confinados na rede cristalina. Nas fronteiras dos grãos e nas superfícies do metal perde-se o padrão da distribuição dos(as) átomos/moléculas da rede de Bravais, afetando a regularidade das superposições das funções de onda. Ocorrem portanto deformações nos arranjos dessas bandas de energia, de forma que os elétrons da corrente são confrontados com variações de potencial nas bandas de condução. Em efeito, isso se traduz em colisões coulombianas - espalhamentos - dos elétrons da corrente com as núvens eletrônicas "distorcidas" dos(as) átomos/moléculas da rede. Por causa desses espalhamentos, a resistividade do condutor aumenta.

Os efeitos de espalhamento são mais pronunciados quando as dimensões laterais do condutor<sup>5</sup> chegam à ordem de grandeza do caminho livre médio do elétron [55]. Por isso, para fios de dimensões menores do que 100 nm, o espalhamento dos elétrons nas superfícies provoca aumento significativo na resistividade do cobre [52]. No ano de 2015 já se produzia, em escala industrial, linhas de 30 nm de espessura e 57 nm de altura nos níveis mais baixos da rede de interconexões [53]. Além disso, ainda em 2014 já se previa o uso de interconexões de 20 nm x 10 nm nas tecnologias MOS de 7 nm [10].

Em termos de condutividade, em escalas nanométricas o cobre perde sua vantagem sobre o alumínio - o caminho livre médio do elétron entre duas colisões sucessivas,  $\lambda^{(e-)}$ , no cobre é maior do que no alumínio, sendo  $\lambda^{(e-)}_{Cu} \approx 40$  nm e  $\lambda^{(e-)}_{Al} \approx 16$  nm, portanto os efeitos de espalhamento no cobre são mais pronunciados [56].

Não é difícil achar na literatura uma vasta caracterização de efeitos de espalhamento em filmes finos [55, 57]. Não obstante, aqui é preciso prever os efeitos de tal fenômeno para fios [50], isto é, quando o espalhamento se dá em duas dimensões reduzidas: nas superfícies de altura e largura da interconexão.

O modelo [51]

$$\rho = \rho_0 \left[ \left[ 1 - \frac{3\alpha}{2} + 3\alpha^2 - 3\alpha^3 \ln\left(1 + \frac{1}{\alpha}\right) \right] + \frac{3}{8} C (1 - p^{fitting}) \frac{1 + AR}{AR} \frac{\lambda^{(e-)}}{w_w} \right], \quad (2.20)$$

<sup>5</sup>bem como as dimensões dos grãos, consequentemente.

com

$$\alpha = \frac{\lambda^{(e-)}}{X_{size0}} \frac{R^{fitting}}{1 - R^{fitting}}, \quad (2.21)$$

foi o usado para corrigir a resistividade tradicional  $\rho_0$  do metal (para o cobre  $\rho_0^{Cu} = 1,7 \mu\Omega \cdot cm$ ). A eq. (2.20) estabelece um  $\rho$  afetado principalmente pelas dimensões perpendiculares à corrente,  $w_w$  (espessura) e  $h_w$  (altura). As dimensões do fio entram no modelo também pelo termo

$$AR = \frac{h_w}{w_w}. \quad (2.22)$$

O modelo usa ainda um parâmetro  $p^{fitting}$  de especularidade do espalhamento nas superfícies. Na dedução das expressões de espalhamento em geral,  $p^{fitting}$  é uma medida de quão elástica é a colisão (do elétron) com as superfícies (do fio), podendo variar de 0 a 1 pela fração do momento inicial que o elétron leva após a colisão. Na prática, o modelo da eq. (2.20) vale-se de  $p^{fitting}$  como um parâmetro de ajuste experimental. Nesse trabalho foi usado o valor 0.7, baseado em inferências empíricas da literatura <sup>6</sup> [10].

A constante  $C$  também dita o mecanismo de espalhamento e também está relacionada com a geometria do fio. O valor de  $C$  é calculado [49] por aproximação da solução exata de um problema de transporte em um condutor retangular com espalhamento na superfície. Para seção transversal retangular temos  $C \approx 1,2$ . Os espalhamentos nas fronteiras entre grãos também estão sendo levados em consideração nesse modelo, pela dependência com o tamanho médio dos grãos na direção da corrente,  $X_{size0}$ .

O parâmetro  $R^{fitting}$  é usado para ajuste experimental do modelo. Analogamente a  $p^{fitting}$ , a motivação física de  $R^{fitting}$  refere-se à refletividade das colisões nas fronteiras de grãos<sup>7</sup>, podendo variar entre 0 e 1. Para o cobre, nesse trabalho foi considerado  $R^{fitting} = 0,3$ , baseado na literatura experimental [10].

As oscilações térmicas dos átomos afetam as posições das bandas de energia e a ocorrência de colisões. Mesmo assim, o modelo da eq. (2.20) não apresenta dependência de  $\rho/\rho_0$  com  $T$ , sugerindo que alterações estruturais no condutor afetam a resistividade igualmente em diferentes temperaturas. De fato, é demonstrado experimentalmente que o ajuste dos modelos de perturbação da resistividade independe da temperatura dos testes [51].

## ALTERAÇÃO LOCAL DE RESISTIVIDADE

Para as dimensões dos condutores nos próximos nós de fabricação, o efeito de espalhamento é muitíssimo importante. O aumento na resistividade passa a ser muito sensível ao escalamento das interconexões. Além de corrigir a resistividade da geometria inteira, também é importante se levar em conta a alteração da resistividade na região da interconexão com seção transversal deteriorada devido à presença do vazio.

<sup>6</sup>tendo em vista a correspondência com as dimensões da interconexão analisada nas simulações desse trabalho.

<sup>7</sup>A motivação física de  $R^{fitting}$  é análoga à de  $p^{fitting}$ , todavia a lógica que quantifica aquela é oposta (complementar), correspondendo não à fração remanescente do fluxo após espalhado mas sim à proporção do fluxo que é defletida de sua direção original.

Com o pulso gaussiano  $g$ , faz-se uma distribuição em torno de  $x_{void}$  e calcula-se um novo  $\rho$  na região estrangulada pelo vazio. Usando a forma da eq. (2.20), mas agora com a "nova altura",  $y_{vlp}$ , da linha estrangulada pelo vazio, essa pesquisa propôs que

$$y_{vlp} < h_w \Rightarrow \blacksquare \rho := \{ \blacksquare \cdot g((x - x_{vlp})VL) \} \cdot \rho \big|_{h_w := y_{vlp}} \oplus \{ \blacksquare \cdot g((x - x_{vlp})VL) \}^c \cdot \rho, \quad (2.23)$$

onde  $x_{vlp}$  e  $y_{vlp}$  são variáveis calculadas com o método de interface difusa e estão esclarecidas nas eqs. (3.16) e (3.15).

O efeito local de espalhamento atribui aumento da resistividade no caminho de condução onde a altura (direção  $y$  da geometria das simulações) é estreitada pela presença do vazio. O comprimento (direção  $x$ ) dessa região deve, portanto, acompanhar o comprimento do vale do vazio, o qual será denotado  $L_{vlp}$  (ver Figura 3.6 e eq. (3.14)). Para isso, na eq. (2.23) o fator  $VL$  estica ou encolhe o pulso gaussiano. É portanto uma função que varia durante a simulação, isto é

$$VL = VL(L_{vlp}(t)) . \quad (2.24)$$

## 2.6 Discussão

A eletromigração pode ser um grande problema para conexões de potência e de terra. Conexões de sinal, que conduzem bidirecionalmente, são relativamente imunes à eletromigração [58]. O tempo de falha de fios de alumínio conduzindo AC é quatro ordens de grandeza maior do que de fios de alumínio conduzindo DC [59]. Isso sugere possibilidades de tecnologias híbridas, onde metais de alta condutividade e alta temperatura de fusão (e portanto mais resistentes à difusão de vacâncias), seriam usados para distribuição de potência enquanto outros metais são usados, agora priorizando menor  $\lambda^{(e-)}$ , nas conexões que propagam sinais. Para fios que precisem ser muito pequenos e que conduzam bidirecionalmente (interconexões locais de sinal), não há preocupação com eletromigração, o que torna os metais de baixo  $\lambda^{(e-)}$  bons candidato por apresentar menor efeito de espalhamento. Para interconexões maiores, i. e. de seção transversal maior, os metais de maior  $\lambda^{(e-)}$  podem ser usados normalmente, valendo-se de sua melhor condutividade e possivelmente melhor resistência à eletromigração, em interconexões cujas dimensões não são críticas para efeitos de espalhamento.

Com a diminuição das interconexões, a capacitância por unidade de comprimento não se altera. A resistência por unidade de comprimento, entretanto, aumenta com o escalamento. Primeiro, obviamente, porque a área da seção transversal diminui. Outro grande problema é o aumento da resistividade do metal pelos efeitos de espalhamento. Além disso, a barreira de difusão, que tem condutividade menor [36], ocupa (proporcionalmente) cada vez mais espaço na trincheira da interconexão, pois seu escalamento está limitado a um valor mínimo de espessura necessária para anular determinadas difusões (com dos átomos de cobre para fora da trincheira) através dela.

De maneira geral, as pesquisas na área de microeletrônica dão as diretrizes para

as inovações nos circuitos integrados. Entre as publicações científicas e a implementação em escala industrial leva, naturalmente, algum tempo. Há uma grande chance de que, no estágio do nó de 11 nm, a indústria da microeletrônica ainda não tenha implementado um novo material que aperfeiçoe as interconexões de cobre [60].



### 3 O Método da Interface Difusa

37

Um corpo composto por diferentes materiais terá, na interface entre eles, uma distribuição espacial descontínua de suas propriedades físicas. Essas descontinuidades são inconvenientes para integração numérica de modelos matemáticos nas regiões de interface. Isso pode ser resolvido transformando as propriedades físicas em variáveis espaciais e amortecê-las (ou amplificá-las) continuamente à medida em que trocam de domínio.

Como mostra a Figura 3.1, um parâmetro  $\phi$  descreve implicitamente as regiões de dois domínios. A escala de cores indica que  $\phi$  define o domínio da esquerda (vermelho) como sendo o conjunto de pontos nos quais  $\phi = +1$ . À direita, em azul, descreve-se o espaço de outro domínio como sendo a região dos pontos nos quais  $\phi = -1$ . Na transição entre os domínios  $\phi$  varia continuamente entre  $+1$  e  $-1$ , descrevendo uma interface de determinada espessura.

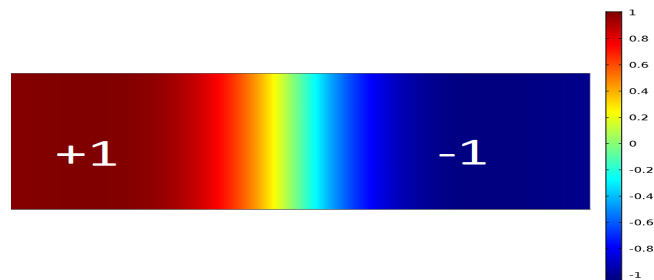


Figura 3.1: Geometria retangular com dois domínios (azul e vermelho) descritos implicitamente por um parâmetro espacial  $\phi$ . Escala de cores indica a variação do parâmetro na interface difusa.

Esse artifício foi inicialmente motivado para simulação de fenômenos de mecânica de fluidos. A Figura 3.2 mostra uma evolução temporal da distribuição de  $\phi$  descrevendo implicitamente o rearranjo das duas fases imiscíveis de um fluido.

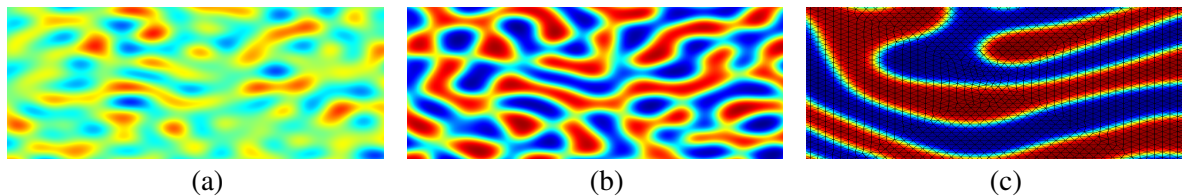


Figura 3.2: (a) Estado inicialmente agitado. (b) Fases azul e vermelha no instante de 3 s se separando desde o repouso. (c) Depois de 10 s, com grade de simulação exibida.

A proposta desse trabalho é aplicar o método da interface difusa para descrever vazios de eletromigração dentro de materiais condutores. A Figura 3.3 ilustra uma estrutura

de interconexões e via<sup>123</sup>. Um vazio de eletromigração azul está implicitamente localizado na região dos pontos da interconexão de baixo para os quais  $\phi \approx -1$ , na interconexão de baixo, próximo à via. O substrato do material condutor está implicitamente definido por  $\phi = +1$ , na região vermelha. O gradiente de cores define, de forma difusa, a interface metal-vazio.

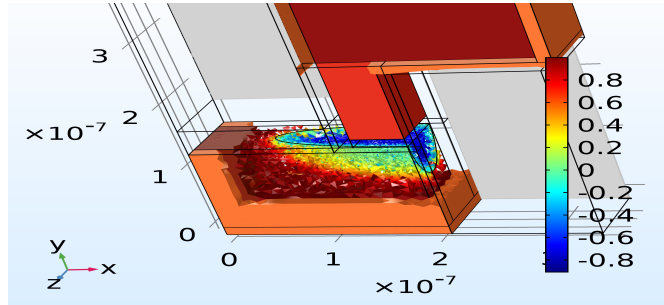


Figura 3.3: Parâmetro  $\phi$  definindo metal, vazio e interface difusa na interconexão inferior. Barreira de difusão, via e material dielétrico não estão consideradas na escala de cores.

A Figura 3.4 ilustra a aplicação do parâmetro  $\phi$  na geometria usada no software.

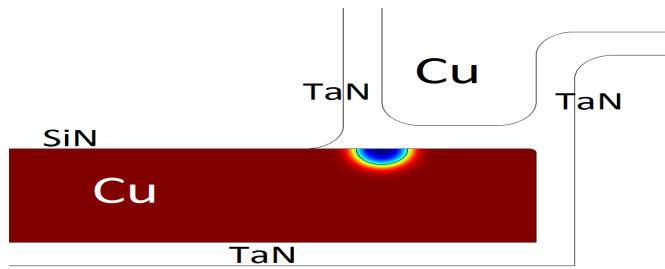


Figura 3.4: Parâmetro  $\phi$  definindo metal, vazio e interface difusa na interconexão inferior.

O método da interface difusa é particularmente útil para problemas associados ao movimento de fronteiras e contornos, sendo muito vantajoso por não haver necessidade de redefinir a grade de elementos finitos cada vez que a interface muda de posição, o que seria muito custoso computacionalmente.

A distribuição de  $\phi$  na geometria evolui sob a forma de Cahn-Hilliard [61],

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot \chi \lambda \nabla \mu_s, \quad (3.1)$$

de forma que ao vetor  $\vec{u}$  atribui-se os fenômenos físicos responsáveis pela convecção dos domínios, o que tem o efeito de movimentar a interface [62, 63]. O termo  $\mu_s$  é o potencial químico de superfície,

$$\mu_s = -\nabla \cdot \epsilon^2 \nabla \phi + (\phi^2 - 1)\phi + \frac{\epsilon^2}{\lambda} \frac{\partial \sigma_s}{\partial t}, \quad (3.2)$$

<sup>1</sup>Imagem meramente ilustrativa. As simulações desse trabalho foram realizadas em 2D.

<sup>2</sup>Apesar de não estar completamente ilustrada na figura, a barreira de difusão envolve também a via

<sup>3</sup>A capa não está exibida. Ela cobre a superfície de cima da interconexão até antes do acoplamento da via, sob a qual há camada de barreira de difusão

$\chi$  e  $\lambda$  são termos associado à mobilidade e à tensão superficial  $\sigma_s$ , sendo

$$\lambda = \frac{3\epsilon\sigma_s}{2\sqrt{2}} . \quad (3.3)$$

Esses termos são associados à interface difusa, isto é, à superfície metal-vazio. Nos modelos de interface difusa,  $\epsilon$  é um parâmetro que controla a espessura da interface, como será mostrado mais adiante.

O software usado para as simulações foi o *Comsol Multiphysics<sup>TM</sup>* [64], que possui um módulo de integração numérica da eq. 3.1. Define-se a distribuição espacial inicial ( $t = 0$ ) de  $\phi$  na geometria<sup>4</sup> e aplica-se nos termos da eq. (3.1) os aspectos físicos pertinentes à evolução do vazio de eletromigração.

### 3.1 Relações espaciais na geometria

Funções simples de  $\phi$ , como

$$bulk(x, y, t) = \frac{\phi(\vec{r}, t) + 1}{2} , \quad (3.4)$$

$$void(x, y, t) = \frac{1 - \phi(\vec{r}, t)}{2} \quad (3.5)$$

e

$$interface(x, y, t) = 1 - \phi^2(\vec{r}, t) , \quad (3.6)$$

atribuem espacialmente à geometria uma proporção (de 0 a 1) sobre serem metal, vazio ou interface, respectivamente. Essas expressões são exemplos de ferramentas para se atribuir as propriedades físicas aos diferentes domínios. Por exemplo, no vazio  $\phi = -1$  e  $bulk(\phi = -1) = 0$ . Então, para uma simulação fidedigna de corrente elétrica no cobre basta corrigir a condutividade  $\sigma_{Cu}^{(e-)}$  multiplicando-a por  $bulk(\phi(x, y, t))$ . Dessa forma anulamos a condução no vazio durante toda sua evolução e qualquer que seja seu formato, amortecendo  $\sigma_{Cu}^{(e-)}$  de forma contínua à medida em que entramos no domínio do azul. Obviamente, podemos ainda nos valer de outras funções de  $\phi$  que distribuam proporções no espaço como for útil. Com esses conceitos podemos redefinir

$$\blacksquare \equiv \int \{bulk + void\} d\vec{r} . \quad (3.7)$$

Uma vez integrada a eq. (3.1), os arranjos espaciais de  $\phi$  ao longo do tempo nos permite monitorar diretamente o volume<sup>5</sup> por

$$V_{void}(t) = \int_{\blacksquare} void(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (3.8)$$

<sup>4</sup>A partir de um vazio já nucleado em determinada posição.

<sup>5</sup>Conceito de "volume" genérico do ponto de vista matemático, pois nas simulações desse trabalho os vazios serão descritos em 2D

e a posição média,  $(x_{void}, y_{void})$ ,<sup>6</sup> do vazio por

$$x_{void}(t) = \frac{\int_{\blacksquare} x_{void}(\vec{r}, t) d\vec{r}}{V_{void}} \quad (3.9)$$

e

$$y_{void}(t) = \frac{\int_{\blacksquare} y_{void}(\vec{r}, t) d\vec{r}}{V_{void}} . \quad (3.10)$$

### TENSÃO SUPERFICIAL E MOBILIDADE

Uma alteração que deve ser feita para descrição de domínios sólidos, como é o caso desse trabalho, é a restrição à superfície do termo de mobilidade  $\chi$ . A função  $interface(\phi(x, y, t))$  restringe a distribuição espacial em torno do centro da interface ( $\phi = 0$ ). Fazendo  $\chi : \Leftrightarrow \chi_{interface}$ , as propriedades físicas que dizem respeito à superfície metal-vazio -  $\mu_s$ ,  $\lambda$ ,  $\sigma_s$ ,  $\gamma$  e  $W$  - são atribuídas somente à essa interface. Há ainda a necessidade de se somar uma mobilidade fixa  $\chi_0$  para o resto da geometria, por questões de estabilidade e convergência do modelo [65].

Quando a superfície do condutor é deformada elasticamente, as núvens dos orbitais eletrônicos dos planos mais externos da rede são forçadas a se sobrepor, seja por baixo (se a deformação for convexa), ou por cima (se a deformação for côncava). A mobilidade será provocada pela distensão ou contração das ligações covalentes bem como pela interação coulombiana entre as núvens dos últimos orbitais, opondo-se ao encurvamento. O valor de  $\chi$  comporta-se proporcionalmente à facilidade com que os átomos se reposicionam na superfície [61, 66], de modo que a mobilidade pode ser relacionada à difusividade  $D_s$  por

$$\chi = \frac{4\Omega_a D_s}{\pi \epsilon^3} . \quad (3.11)$$

A deformação  $\kappa$  da interface pode ser quantificada [62, 63] por

$$\kappa(x, y, t) = \frac{\partial n_x}{\partial x} \frac{\partial n_y}{\partial y} \left( \frac{\partial n_y}{\partial y} \right)^2, \quad (3.12)$$

onde  $(n_x, n_y)$  é o vetor normal à interface.

### VETOR NORMAL À INTERFACE

Com a interface descrita por  $\phi$ , o vetor normal à superfície metal-vazio é calculado por

$$\vec{n}(x, y, t) = \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} = (n_x, n_y) . \quad (3.13)$$

---

<sup>6</sup>Posição 2D

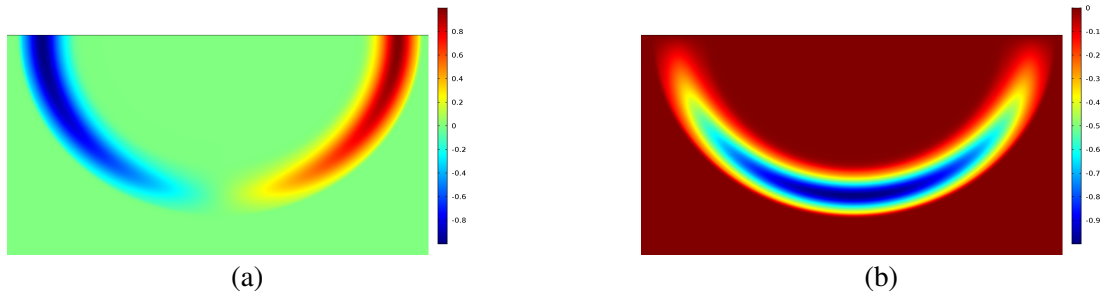


Figura 3.5: Visualização da eq. (3.13) aplicada ao hemisfério sul de uma circunferência descrita com interface difusa. (a) Componente  $n_x(x,y)$ . (b) Componente  $n_y(x,y)$  da direção normal à interface.

### O VALE DO VAZIO

A multiplicação  $(h_w - y) \text{ interface}$  gera uma variável espacial concentrada na parte mais baixa da interface, como mostra a Figura 3.6.

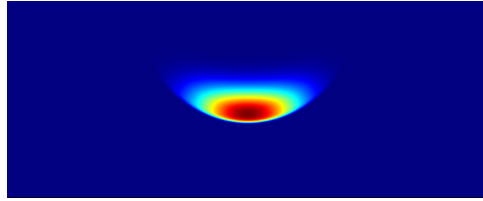


Figura 3.6: Distribuição espacial de  $(h_w - y) \text{ interface}$ , usada como definição da região mais baixa da interface. Como na Figura 3.5, uma semi-circunferência é novamente tomada como exemplo.

A distribuição  $(h_w - y) \text{ interface}$  foi usada para fazer a estimativa

$$L_{vlp} = \frac{1}{L_0} \iint_{\blacksquare} ((h_w - y) \text{ interface}(x, y) \, dx \, dy, \quad (3.14)$$

da largura do vale da interface, o qual está centrado nas coordenadas

$$y_{vlp} = \frac{\iint_{\blacksquare} y (h_w - y) \text{ interface} \, dx \, dy}{\iint_{\blacksquare} (h_w - y) \text{ interface} \, dx \, dy} \quad (3.15)$$

e

$$x_{vlp} = \frac{\iint_{\blacksquare} x (h_w - y) \text{ interface} \, dx \, dy}{\iint_{\blacksquare} (h_w - y) \text{ interface} \, dx \, dy}. \quad (3.16)$$

As construções das eqs. (3.14), (3.16) e (3.15) são usados na eq. (2.23), para determinar a posição do vale e calcular o fator  $VL$ .

#### 3.1.1 Estabilidade do método

Considere inicialmente a interface mostrada na Figura 3.7a. Para que a interface desta distribuição se mova ordenadamente para a direita, todos os pontos do gradiente de cores  $(-1 < \phi < +1)$  devem aumentar a  $\phi + d\phi$  sincronizadamente. É necessário ainda que, também

ao mesmo tempo, os pontos de  $\phi = -1$  imediatamente à direita da interface também aumentem  $d\phi$  cada.

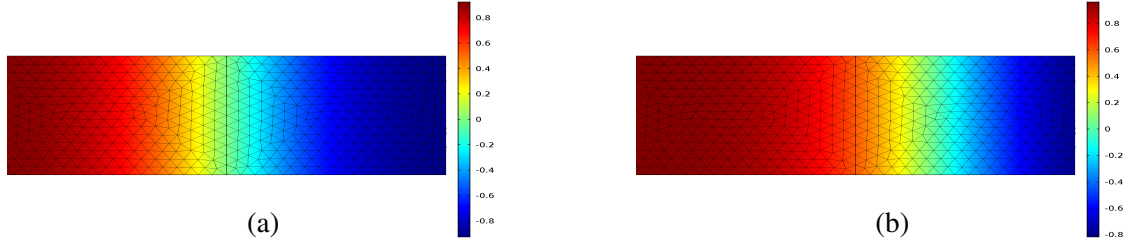


Figura 3.7: Convecção essencial da interface difusa. (a) Posição inicial. (b) Uma mudança sincronizada dos valores de  $\phi$  tem o efeito de deslocar a interface para a direita.

O deslocamento mostrado na Figura 3.7 foi promovido pela evolução temporal de  $\phi$  sob a eq. (3.1) com um termo de convecção tal que  $\vec{u}(x, y) = v_0 \hat{x}$ . O termo de convecção da equação de Cahn-Hilliard será sempre uma variável espacial. Na simulação da Figura 3.7, o fato de  $\vec{u}$  ser constante em todos os pontos da geometria faz com que os valores de  $\phi$  mudem simultaneamente em todos os pontos da interface, garantindo a manutenção da suavidade inicial de  $\nabla\phi$  durante todo o deslocamento.

Para aplicar o método de interface difusa à evolução de vazios de eletromigração, atribui-se a velocidade  $v_n$  (eq. (2.9)) ao fator de convecção,  $\vec{u}$ , da equação de Cahn-Hilliard. Adaptando  $v_n$  para  $\vec{u}$ , os transportes de massa são aplicados ao método de interface difusa através de

$$u_x(t) = -\frac{\partial j_{s,y}}{\partial y} n_x - \Omega_v j_{v,x} n_x \quad (3.17)$$

e

$$u_y(t) = -\frac{\partial j_{s,x}}{\partial x} n_x - \Omega_v j_{v,y} n_x \quad (3.18)$$

Assim, a velocidade de convecção passa a ser uma variável regida espacialmente por  $\vec{n}$ , que por sua vez, de acordo com a eq. (3.13), é uma distribuição concentrada em torno de  $\phi = 0$ , como na Figura 3.5.

Devido à presença de  $n_x$  e  $n_y$  nas eqs. (3.17) e (3.18), ao aplicarmos os fluxos de eletromigração na definição de  $\vec{u}$ , teremos-no concentrado em  $\phi = 0$ , portanto não constante na direção perpendicular à interface. De acordo com o argumento do início desta seção, a distribuição concentrada de  $\vec{u}$  pode ser problemática para a simulação, pois a convecção estará induzindo uma mudança mais intensa de  $\phi$  no centro da interface, de forma que os pontos do espectro de cores não evoluirão sincronizadamente.

### REDISTRIBUIÇÃO ESPACIAL "*shift*" DA VELOCIDADE DE CONVECÇÃO

Podemos multiplicar a velocidade de convecção por uma função *shift* que seja combinação de variáveis espaciais acopladas a  $\phi$ : como *bulk*, *interface*, *void*,  $\phi^2$  etc. Compor *shift*  $\vec{u}$  pode ser útil para alterar a distribuição espacial de  $\vec{u}$  de forma a compensar que alguma região do gradiente de cor se estique ou encolha inconvenientemente. Como exemplo desse

método, foi usada a função

$$shift(x, y, t) = 0,5 + \phi^2 . \quad (3.19)$$

A variável  $\phi^2(x, y, t)$  tem valor zero no centro da interface e, simetricamente à interface, cresce até  $\phi^2 = 1$  conforme é avaliada mais distante do centro da mesma, no sentido de ambos os domínios. Portanto, ao multiplicar  $shift \vec{u}$  a distribuição espacial de  $\vec{u}$  no centro da interface é amortecida, tornando-a 0,5 do seu valor original.

#### REDISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DA VELOCIDADE DE CONVECÇÃO POR EXTRUSÃO DE PONTOS

Ainda tendo em vista o que foi discutido a respeito da Figura 3.7, criou-se uma maneira mais rigorosa de redistribuir a velocidade de convecção - atribuindo a qualquer ponto  $(x, y)$  da geometria um valor para  $\vec{u}$  igual a seu valor avaliado em  $(\check{x}, \check{y})$ , sendo este último o ponto da interface mais próximo de  $(x, y)$ . Fazendo a extrusão espacial de pontos definida pelas eqs. (3.21) e (3.22), podemos impor

$$\vec{u} \xrightarrow{(\check{x}, \check{y})} \vec{u}|_{(\check{x}, \check{y})} . \quad (3.20)$$

Dessa forma fazemos com que  $\vec{u}$  seja radialmente simétrico em torno da interface, o que proporcionaria uma convecção sincronizada dos pontos da mesma. Para tal propósito, as construções

$$\check{x}(x, y, t) = \frac{1}{V_{rmpi}} \iint_{\blacksquare interface(\check{x}, \check{y}, t)} \frac{\check{x} d\check{x}d\check{y}}{(\sqrt{(x - \check{x})^2 + (y - \check{y})^2} + 0,1\epsilon_0)} \quad (3.21)$$

e

$$\check{y}(x, y, t) = \frac{1}{V_{rmpi}} \iint_{\blacksquare interface(\check{x}, \check{y}, t)} \frac{\check{y} d\check{x}d\check{y}}{(\sqrt{(x - \check{x})^2 + (y - \check{y})^2} + 0,1\epsilon_0)} , \quad (3.22)$$

com

$$V_{rmpi}(x, y, t) = \iint_{\blacksquare interface(\check{x}, \check{y}, t)} \frac{d\check{x}d\check{y}}{(\sqrt{(x - \check{x})^2 + (y - \check{y})^2} + 0,1\epsilon_0)} , \quad (3.23)$$

são usadas. O termo " $0,1\epsilon_0$ " no denominador serve para evitar a divergência do quociente quando a integração for avaliada na região da interface. Fora da interface,  $0,1\epsilon_0$  é no mínimo uma ordem de grandeza menor do que qualquer valor  $\sqrt{(x - \check{x})^2 + (y - \check{y})^2}$ , portanto não se prejudica o propósito das equações.

#### CONTROLE DE ESPESSURA DA INTERFACE

A amplitude ortogonal da interface é controlada pelo parâmetro  $\epsilon$ , fazendo com que essa adquira uma espessura de  $\pi\epsilon$  [42]. As Figuras 3.8 e 3.9 mostram, em dois contextos diferentes, a interface atingindo uma região com grade de elementos finitos mais grosseira, causando diminuição da quantidade de nós de simulação abrangidos na região da interface.

Na simulação da Figura 3.8, o parâmetro  $\phi$  descreve o crescimento radial de uma semi-circunferência. Partindo de uma região refinada de grade de simulação (Figura 3.8a), a interface tenta se mover sobre a região de grade mais grosseira. Na Figura 3.8b é visível a perda

de estabilidade da interface. A estabilidade das físicas acopladas a  $\phi$  pode então ser prejudicada.

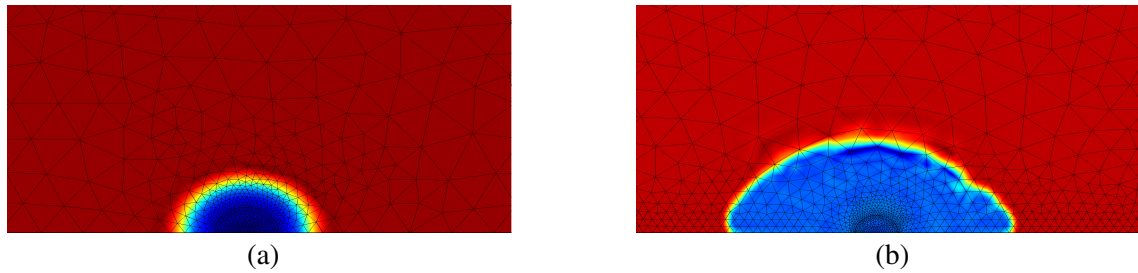


Figura 3.8: Crescimento radial de uma semi-circunferência definida por  $\phi$ . (b) Parâmetro de interface difusa perdendo a estabilidade por sair da região refinada de grade de simulação.

Já para a simulação da Figura 3.9, o problema se traduz em uma perda do espectro de cores esperado, o que é perceptível em 3.9b. Continuando essa simulação de deslocamento da circunferência, verifica-se na Figura 3.9c que todo o espectro de cores da interface foi perdido.

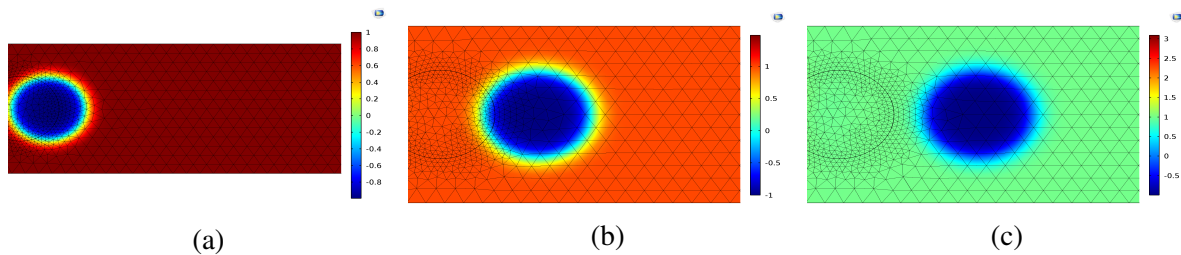


Figura 3.9: Deslocamento de uma circunferência definida por  $\phi$ . (b)-(c) Distribuição anormal de  $\phi$  por sair da região refinada de grade de simulação.

Em ambos os casos, das Figuras 3.8 e 3.9, a resolução de nós de simulação abrangidos pela interface está, em média, mais grosseira. Isso significa que a transição espacial dos valores de  $\phi$  através da interface perdeu refinamento. Dessa forma, todas as variáveis acopladas a  $\phi$  teriam descontinuidades maiores entre os elementos finitos.

Tendo em vista o funcionamento dos esquemas de integração numérica, podemos afirmar que os resultados são muito sensíveis à qualidade da grade de simulação nas fronteiras, curvas e quinas, tornando delicado o trabalho com geometrias mais complexas. Muitos softwares, inclusive o Comsol, possuem recursos para mover a grade no decorrer da simulação. Todavia, para essa pesquisa esse recurso se mostrou muito problemático e de demasiado custo de processamento. Além disso, a utilização de procedimentos de reconstrução da grade destrói a utilidade do método de interface difusa, que está na habilidade de determinar o movimento dos domínios implicitamente através do parâmetro  $\phi$ .

### ESPESSURA VARIÁVEL

Com a pretensão de ser potencialmente extrapolável para qualquer geometria de interconexões e vias, esse trabalho prezou muito pela estabilidade da interface em relação à grade de simulação.



Em todos as pesquisas realizadas até hoje com o método da interface difusa, usa-se o parâmetro  $\epsilon$  constante [42, 65]. Aqui, entretanto, foram testadas diferentes forma de se variar  $\epsilon$  convenientemente ao longo da simulação. Uma fórmula foi desenvolvida para calcular o tamanho médio  $h_{grid}^{mean}$  dos elementos de grade  $h_{grid}$  dentro da interface, através de

$$h_{grid}^{mean}(t) = \frac{1}{\iint_{interface} dx dy} \iint_{\blacksquare} h_{grid}(x, y) interface(x, y, t) dx dy . \quad (3.24)$$

Isso será usado para tornar  $\epsilon$  uma variável dependente do tempo, de forma a induzir que a interface tenha uma espessura  $n_{in}$  vezes o valor de  $h_{grid}^{mean}$ . Assim,

$$\pi \epsilon(t) = n_{in} h_{grid}^{mean}(t) \quad (3.25)$$

amplia ou contrai a interface para garantir que dentro dela haja uma resolução consistente de elementos finitos.

A convergência ( $\epsilon \rightarrow 0$ ) do método de interface difusa para vazios de eletromigração já foi demonstrada [42].

### 3.1.2 Fidedignidade do método

Elaborou-se um método simples para se analisar se a evolução temporal da equação de Cahn-Hilliard de fato concebe o comportamento físico que se deseja simular.

Considerando o crescimento radial de uma semi-circunferências definida por  $\phi$ , se o vetor de convecção for  $\vec{u} = n_x v_0 \hat{x} + n_y v_0 \hat{y}$ , supõe-se um crescimento com velocidade radial  $v_0$ . Para um crescimento fidedigno desse semi-círculo espera-se então que

$$\left| \frac{dy_{vlp}}{dt} \right| = v_0 . \quad (3.26)$$

Em vista disso, para avaliar a fidedignidade da simulação foi adotada a grandeza

$$f^f = \frac{\left| \frac{dy_{vlp}}{dt} \right|}{v_0} \quad (3.27)$$

como sendo um fator de fidedignidade.

Antes de usar o método de interface difusa para simular os vazios de eletromigração, dedicou-se uma análise cuidadosa ao funcionamento do método em si. Para isso, os aspectos discutidos no Capítulo 3 foram avaliados separadamente e relacionados à consistência do método.

### 4.1 Mobilidade e relaxamento da curvatura

Na Figura 4.1 está a evolução temporal de  $\phi$  pela eq. (3.1) com  $\vec{u} = 0$ . O encurvamento da interface, inicialmente elipsóide, é suavizado pelo potencial químico de superfície do cobre, com o valor da mobilidade estimado pela eq. (3.11). A distribuição espacial de  $\kappa$  (eq. (3.12)), que quantifica a curvatura, mostra na Figura 4.1c o estado após 10000 horas de evolução temporal da equação de Cahn-Hilliard. Como esperado, devido ao fluxo superficial causado pelo gradiente de potencial químico (eq. (3.2)), o vazio tende ao formato esférico - para o qual o gradiente de curvatura tende a se anular.

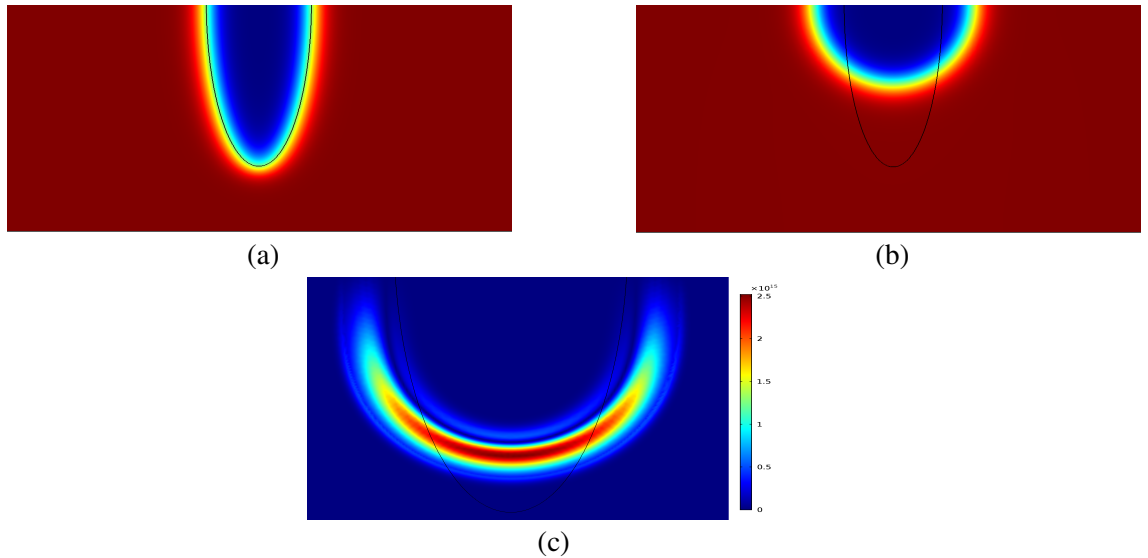


Figura 4.1: (a) Formato elipsóide em  $t=0$ . (b) Interface se rearranja após 22000 horas de relaxamento. (c) Curvatura  $\kappa$  da interface após 10000 horas.

### 4.2 Estabilidade da interface

#### ESTABILIDADE VERSUS MOBILIDADE

A Figura 4.2a é resultado do crescimento radial de uma semi-circunferência a partir da integração numérica de (3.1) com  $\vec{u} = v_0 n_x \hat{x} + v_0 n_y \hat{y}$ . A velocidade de convecção está mais concentrada na região ( $\phi = 0$ ) verde, a qual fica mais esticada. Consequentemente, a região

mais externa do gradiente de cor fica relativamente mais comprimida - induzindo variações mais bruscas de  $\phi$ , o que pode ser problemático para as integrações numéricas nessas regiões.

Analisando mais cuidadosamente a equação de Cahn-Hilliard, observa-se que o termo de mobilidade atua amortecendo  $\nabla \cdot \nabla \phi$ , de forma a suavizar o gradiente de  $\phi$ . Sendo assim, aumentando cem vezes a mobilidade da simulação anterior, obtemos uma variação mais consistente dos valores de  $\phi$  na interface, como se vê na Figura 4.2b.

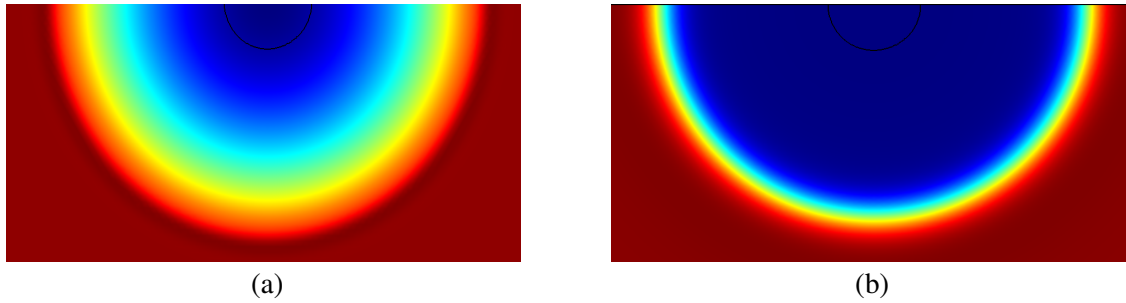


Figura 4.2: Crescimento radial com velocidade concentrada na interface para comparação do gradiente de cores. (a) Com  $\chi = \chi_1$  a região verde parece mais esticada. (b) Para  $\chi = 100 \chi_1$  o gradiente de cores parece mais uniforme.

#### ESTABILIDADE VERSUS GRADE DE SIMULAÇÃO

Nas simulações da Figura 4.3, usando  $\epsilon = \epsilon(t)$  foi possível recuperar a estabilidade das Figuras 3.8 e 3.9. Entre os estados 4.3b, 4.3d e os estados 4.3a, 4.3c, as diferentes densidades de pontos da geometria em contato com a interface provocaram, por meio da eq. (3.25), a amplificação do gradiente de cor. A grade de simulação, quando mais grosseira, demandou que a espessura da interface abrangesse perpendicularmente uma quantidade maior de variações espaciais de  $\phi$ .

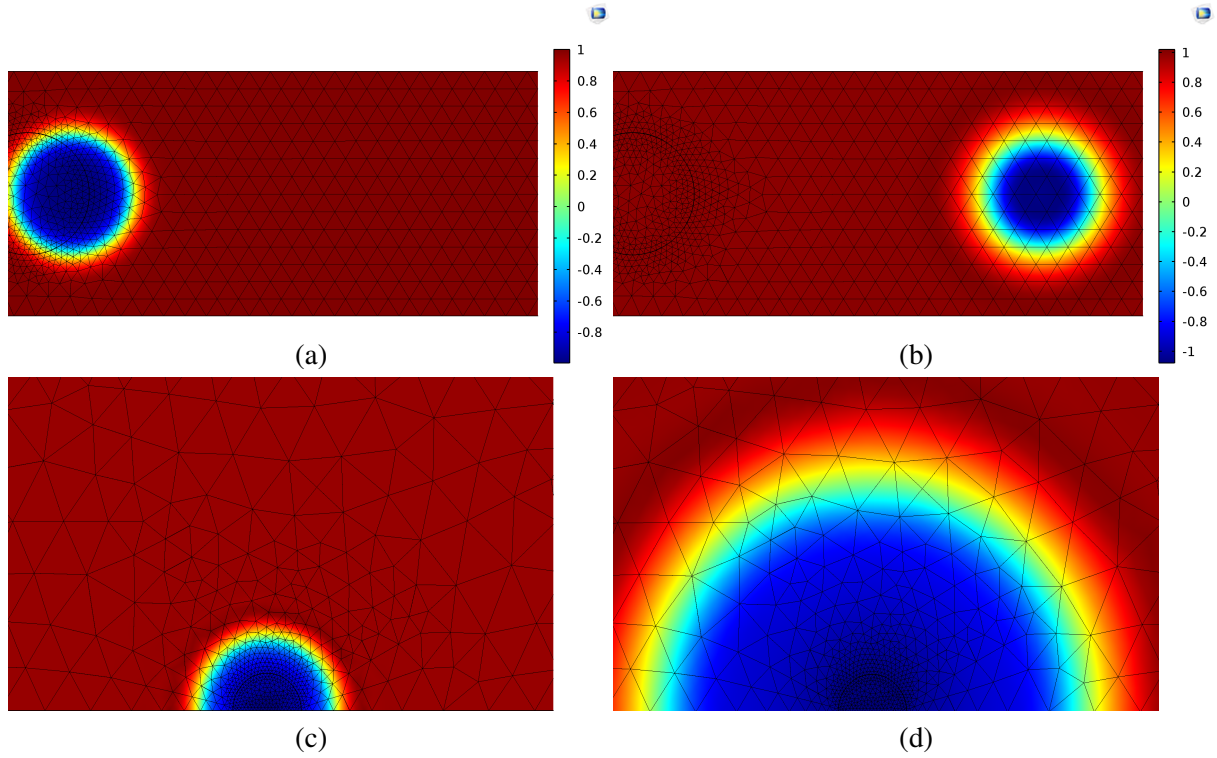


Figura 4.3: Variação do parâmetro  $\epsilon$  pela eq. (3.25) garantiu a estabilidade da simulação em regiões de grade grosseira de elementos finitos. Nos dois casos foi usado  $n_{in}=7$ .

Todas as simulações desse capítulo foram executadas com  $\epsilon$  variável. Algumas Simulações foram executadas concomitantemente com modelos gêmeos excetos pelo fato de  $\epsilon$  ser fixo. Apesar de requisitar computação extra para calcular a eq. (3.24), a simulação com espessura de interface variável acabou antes. Isso porque o ganho em estabilidade exigiu menos iterações numéricas para atingir as tolerâncias de erro da evolução de  $\phi$  e das variáveis físicas. A diminuição no tempo de simulação depende da forma como se configura o acoplamento do modelo à variável  $\phi$  e da sensibilidade à resolução de elementos finitos que as variáveis eventualmente apresentem.

### REDISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DE $\vec{u}$

Tomemos como exemplo a evolução temporal de  $\phi$  na simulação da Figura 4.2a. Mantendo a mobilidade baixa (como é de fato nas superfícies sólidas), multiplicando  $\vec{u}$  por *shift* nota-se na Figura 4.4b melhora no gradiente de cores - a região verde está um pouco menos esticada. Isso indica, portanto, que na simulação com *shift* temos uma distribuição de  $\nabla\phi$  mais suave, o que torna a integração numérica da equação de Cahn-Hilliard - e das físicas acopladas a  $\phi$  - mais estável. Essa função *shift* não é a melhor para corrigir o problema com o gradiente de cores, ela foi apenas usada como exemplo.

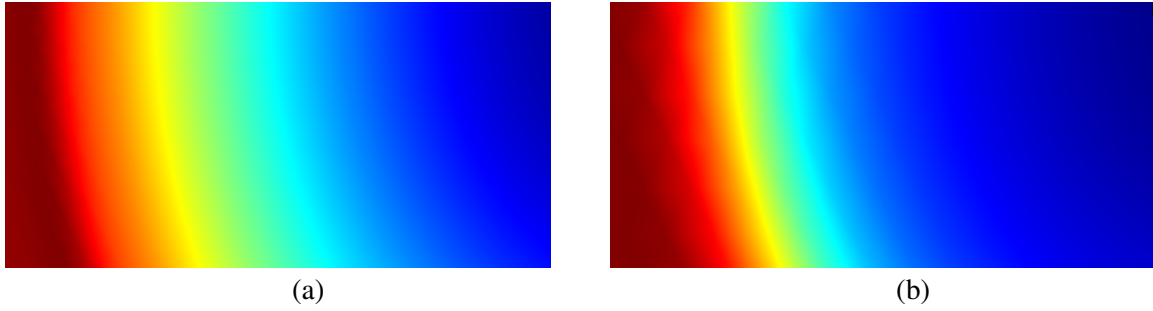


Figura 4.4: Comparação da distribuição espacial de  $\phi$  na interface demonstra o efeito de  $\vec{u}shift$ . (a) Visualização aproximada da interface da Figura 4.2a. (b) Crescimento com redistribuição  $shift$  da convecção.

A simetria radial da Figura 4.5a indica que a extrusão  $(x, y) \rightarrow (\check{x}, \check{y})$  teve o efeito esperado. Fazendo  $\vec{u} \mapsto \vec{u}(\check{x}(x, y, t), \check{y}(x, y, t))$  obteve-se, como mostra o gradiente de cores da Figura 4.5b, uma variação suave de  $\phi$  através da interface.

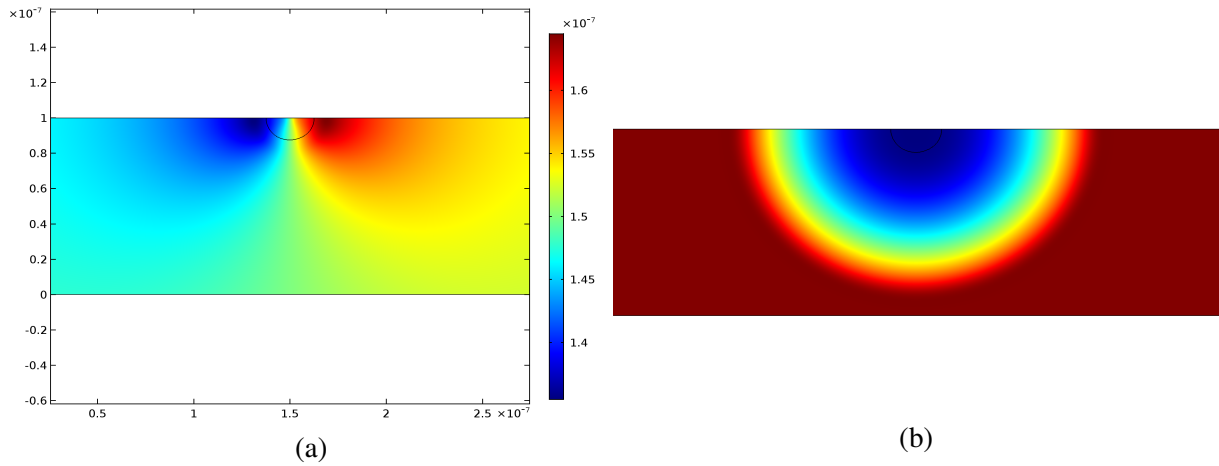


Figura 4.5: (a) Distribuição de  $\check{x}(x,y)$ . (b) Crescimento radial com mobilidade baixa e usando  $\vec{u}$  mapeado simetricamente à interface.

### 4.3 Fidedignidade do deslocamento da interface

Para um mesmo  $\epsilon(t=0)$  e mesma grade de elementos finitos em toda a geometria, foi simulada a evolução da amplitude da interface utilizando  $n_{in} = 4$  (Figura 4.6a),  $n_{in} = 6$  (Figura 4.6b),  $n_{in} = 9$  (Figura 4.6c) e  $n_{in} = 12$  (Figura 4.6d).

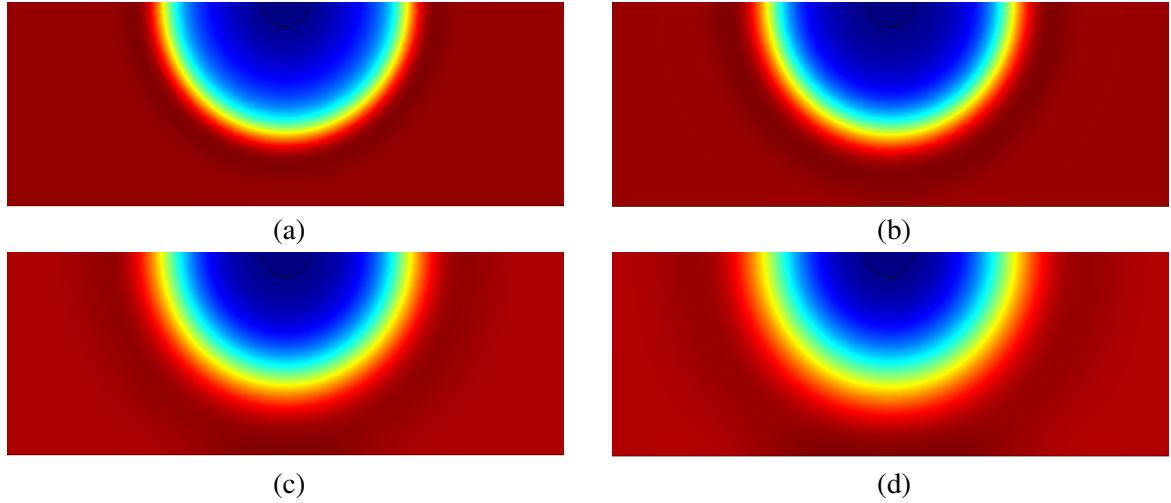


Figura 4.6: Crescimentos radiais com a interface atingindo diferentes amplitudes finais. (a)  $n_{in}=4$ . (b)  $n_{in}=6$ . (c)  $n_{in}=9$ . (d)  $n_{in}=12$ .

O fator de fidedignidade  $f^f$  foi medido em crescimentos radiais com  $\epsilon$  variando como na equação 3.25 para diferentes  $n_{in}$ . Os comportamento de  $f^f$  nas curvas 4.7a ( $n_{in}=4$ ), 4.7b ( $n_{in}=6$ ), 4.7c ( $n_{in}=9$ ) e 4.7d ( $n_{in}=12$ ) indicam perda de fidedignidade como consequência da amplificação da interface.

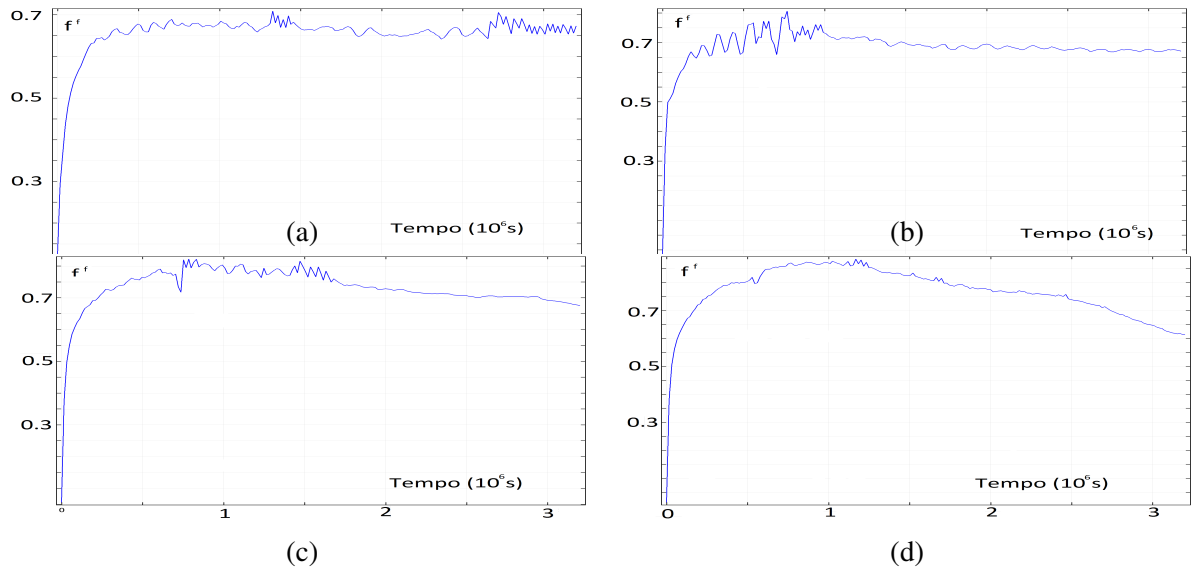


Figura 4.7: Fidedignidade  $f^f$  do deslocamento das interfaces tendendo a diferentes espessuras finais. (a)  $n_{in}=4$ . (b)  $n_{in}=6$ . (c)  $n_{in}=9$ . (d)  $n_{in}=12$ .

A subida acentuada no início curvas da Figura 4.7 são apenas ruídos de computação. Para todos os casos, a velocidade radial efetiva da interface já começa em aproximadamente metade do valor  $v_0$  esperado. De acordo com as eqs. (3.2) e (3.1), o aumento de  $\epsilon$  causa aumento do potencial químico  $\mu_s$  e dilui a evolução temporal de  $\phi$ , amortecendo o efeito de  $\vec{u}$  enquanto incentiva o efeito de  $\mu_s$ .

Também para a simulação com o termo *shift* promovendo a suavidade do gradiente

de cores, o ganho em estabilidade custou na perda de fidedignidade, como mostra a Figura 4.8.

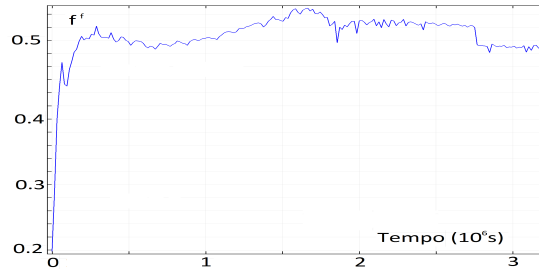


Figura 4.8: Fidedignidade da simulação com  $shift \vec{u}$ , para  $shift = 0,5 + \phi^2$ .

Propõe-se observar como  $shift$  altera a distribuição de  $\vec{u}$  no centro da interface. Verifica-se na Figura 4.9 que a distribuição espacial de  $(\sqrt{n_x^2 + n_y^2}) shift$  não tem o valor 1 esperado para  $\sqrt{n_x^2 + n_y^2}$  no centro, mas aproximadamente 0,55. Isso significa que os termos das eqs. (3.17) e (3.18) estão sendo erroneamente amortecidos por um fator de aproximadamente 0,55.

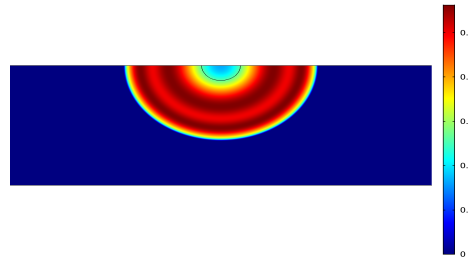


Figura 4.9: Distribuição de  $\sqrt{n_x^2 + n_y^2} shift$ . A legenda de cores, com máximo pouco maior que 0,5, indica o dano na fidedignidade.

Surge então a necessidade de se multiplicar  $\vec{u}$  por um fator de compensação. A eq. (4.1) calcula a média do amortecimento imposto por  $shift$  e cria um termo  $f^c$  que ajuda a corrigir a fidedignidade da velocidade de crescimento do vazio, isto é

$$f^c(t) = \frac{2}{V_{interface}} \iint interface(x, y, t) \sqrt{n_x^2(x, y, t) + n_y^2(x, y, t)} shift(x, y, t) dx dy, \quad (4.1)$$

onde

$$V_{interface}(t) = \iint interface(x, y, t) dx dy. \quad (4.2)$$

A Figura 4.10 mostra a evolução temporal de  $f^c$  na simulação da Figura 4.4b.

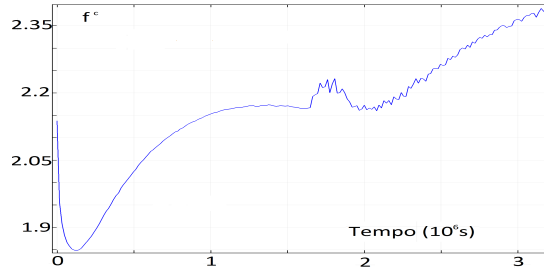


Figura 4.10: Evolução temporal do fator de compensação.

O valor de  $f^c$  na curva 4.10 de fato varia em torno dos valores esperados de acordo com a curva 4.8 - a média, na interface, da velocidade corrigida por  $f^c \vec{u}$  tende a voltar à condição de fidedignidade  $|dy_{vlp}/dt| \rightarrow v_0$ . Isso é inferido pela comparação das Figuras 4.9 e 4.10 mas, naturalmente, a validade de tal inferência pode ser mais rigorosamente acompanhada monitorando-se a correspondência

$$\frac{1}{V_{interface}} \iint_{interface} f^c shift |\vec{u}| dx dy \hat{=} v_0 . \quad (4.3)$$

## 4.4 Discussão

A simulação com extrusão de pontos foi muito mais demorada do que as outras. Já as simulações com *shift* e  $f^c$  e as simulações com  $\epsilon$  variável não demoraram significativamente mais pra rodar do que as mais simples - aparentemente não demandaram grande aumento no custo de processamento.

Em essência, de tudo que foi discutido sobre a estabilidade das simulações com interface difusa infere-se a seguinte condição básica para a estabilidade: é conveniente que a diferença de valores em pontos vizinhos da geometria seja contínua, o que pode ser monitorado pelas grandezas

$$\frac{d}{dt}(\max[\nabla\phi]) \quad (4.4)$$

ou

$$\frac{d}{dt}(\iint \nabla\phi dx dy) . \quad (4.5)$$



## 5 Evolução de vazios de eletromigração 53

Após familiarização com o funcionamento do método de interface difusa, os fenômenos físicos discutidos no Capítulo 3 foram aplicados à equação de Cahn-Hilliard para descrição da evolução de vazios induzida por eletromigração.

### 5.1 Parâmetros básicos da estrutura

A seção transversal da parte de cobre é de  $h_w = 72$  nm de altura (direção y, paralela ao plano do texto) por  $w_w = 144$  nm de largura (direção z, perpendicular ao plano do texto). Uma barreira de TaN de 18nm de espessura envolve as superfícies do cobre, exceto pela superfície superior da interconexão - onde há a capa.

Para material condutor principal da interconexão, é usada na geometria do software a condutividade elétrica do cobre a 20°C,  $\sigma_{Cu}^{(e^-)} \approx 5.96 \cdot 10^7$  S/m [26], apenas após esta ser submetida à correção de efeito de espalhamento da eq. (2.20). À barreira de difusão atribuiu-se a condutividade elétrica do nitreto de tântalo [36]. Em nenhuma simulação foi aplicada alteração de condutividade como efeito direto da temperatura.

Em todas as simulações desse capítulo a condutividade do cobre está aplicada à geometria através de  $\sigma_{Cu}^{(e^-)} \text{ bulk}(\vec{r}, t)$ . A Figura 5.1 ilustra esse artifício mostrando uma simulação de corrente elétrica no cobre com vazio semi-circular na parte superior. A legenda de cores indica a distribuição espacial da densidade total de corrente  $|\vec{j}| = \sqrt{j_x^2 + j_y^2}$ , em A/m<sup>2</sup>.

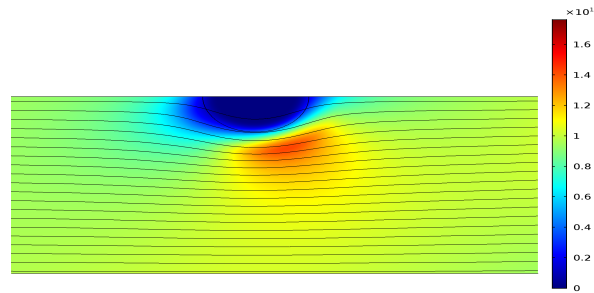


Figura 5.1: Densidade total de corrente em uma geometria com vazio na parte superior. A condutividade elétrica está acoplada à distribuição espacial de  $\phi$ .

Na Figura 5.1 é possível observar a corrente dar a volta na parte deteriorada da interconexão. Isso porque a condutividade elétrica está acoplada à distribuição de  $\phi$ , que descreve o vazio. Assim, o aumento da área do vazio causará naturalmente um aumento na resistência total da interconexão.

A densidade de corrente aplicada em todas as simulações desse capítulo é  $1 \text{ MA/cm}^2$  - valor típico de operação de interconexões em CIs -, exceto nas simulações para avaliação do tempo de falha.

## 5.2 Fluxos de vacâncias nas superfícies

O coeficiente  $D_v$  de transporte de massa foi aplicado às simulações usando estimativas feitas a partir de dados experimentais da literatura [14,34,46]. A difusividade de vacâncias é reportada às adesões interatômicas nas diferentes regiões do condutor. O parâmetro  $D_v$  será então uma variável espacial<sup>1</sup> definida de forma a abranger distintas ocorrências de eletromigração nas diferentes partes da geometria.

Butrymowicz [41] usou a forma de Arrhenius (eq. (2.2)) para ajustar experimentalmente o comportamento da difusividade de vacâncias dentro de um monocristal de cobre, propriedade esta que será denotada " $D_{self}^{Cu}$ ". Com o ajuste de Butrymowicz para o modelo de Arrhenius, o valor de  $D_{self}^{Cu}$  usado nesse trabalho foi estabelecido para  $T = 573 \text{ K}$ , temperatura típica de testes de confiabilidade de interconexões.

Os fluxos de vacâncias nas superfícies e nos contornos de grãos são algumas ordens de grandeza maiores do que o fluxo dentro de um cristal. Sendo assim, o valor de  $D_{self}^{Cu}$  será usado para normalizar as outras difusividades. As relações entre as difusividades usadas nas simulações foram obtidas de dados experimentais da literatura [12, 29, 34, 46–48].

A difusividade de vacâncias na superfície cobre-capla foi definida por

$$D_v^{cap} = 1000 D_{self}^{Cu} \quad (5.1)$$

e a eletromigração ao longo das superfícies entre o cobre e a barreira de difusão foi atribuída como sendo

$$D_v^{TaN} = 100 D_{self}^{Cu} . \quad (5.2)$$

Para simular os fluxos nas superfícies de um metal monocristalino, a difusividade  $D_v$  é então atribuída à geometria pela composição

$$\blacksquare D_v := \coprod_{cap; TaN} \left\{ \blacksquare | D_v(\vec{r}) = D_{self}^{Cu} \right\}^C \oplus \left\{ \blacksquare | D_v(\vec{r}) = D_{self}^{Cu} \right\} \cdot D_{self}^{Cu} . \quad (5.3)$$

A Figura 5.2 ilustra a simulação da eq. (2.1) com  $D_v$  definido como na eq. (5.3). Nas superfícies do metal foi imposta a condição de que não haja fluxo perpendicular, haja vista que é esse o efeito da barreira de difusão. A escala de cores quantifica em  $10^4 m^{-2} s^{-1}$  o fluxo total  $|\vec{J}_v|$  na geometria.

---

<sup>1</sup>constante no tempo

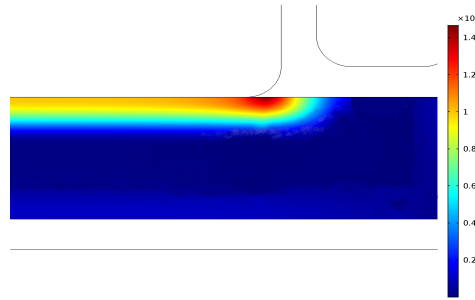


Figura 5.2: Fluxo total de vacâncias com as devidas difusividades atribuídas às superfícies do cobre.

Com o resultado da simulação de  $\vec{J}_v$  nas superfícies, a integração de  $c_v$  na geometria - eq. (2.5) - retornou a evolução temporal da concentração de vacâncias, como mostra a Figura 5.3.

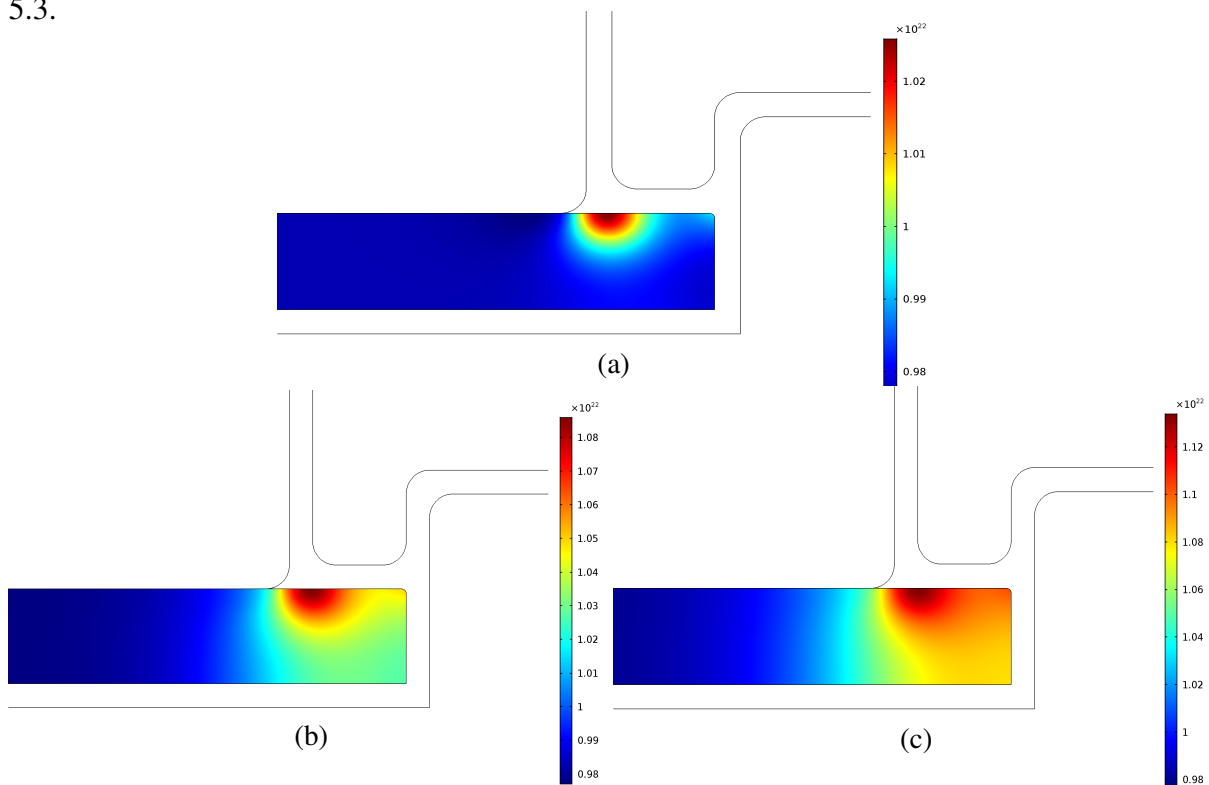


Figura 5.3: Evolução da concentração de vacâncias, em  $m^{-3}$ , devida aos fluxos nas superfícies. (a) Depois de 2700 horas. (b) Depois de 22000 horas. (c) Depois de 44000 horas de operação da interconexão.

### 5.2.1 Evolução de vazios submetidos aos fluxos de superfície

A literatura de testes experimentais de eletromigração fornece uma grande quantidade de imagens de microscopia eletrônica que mostram vazios nas interconexões [11–14, 46, 48, 67]. Essas referências serviram para a escolha de cinco regiões mais típicas para se definir a posição do vazio inicialmente nucleado, como se observará a seguir nas Figuras 5.4, 5.5, 5.6, 5.7 e 5.8. As simulações das Figuras 5.2 e 5.3 sugerem, em especial, uma tendência ao acúmulo de vacâncias embaixo da via - desencadeando a simulação da Figura 5.4 - e nas superfícies de menor potencial da interconexão (do lado direito das figuras) - Figura 5.5. Infere-se também a

possibilidade de variações de fluxo ao longo da superfície cobre-capa, já que a difusividade é exponencialmente sensível a variações de adesão interatômica, causando eventualmente acúmulo de vacâncias em determinadas regiões dessa superfície<sup>2</sup> - Figura 5.6. Além do fluxo de vacâncias, outros aspectos de operação ou fabricação podem estar relacionados à nucleação de vazios. As modelagens não incluem as causas de tal fenômeno, então as regiões de nucleação usadas para simulação foram apropriadas simplesmente da observação de imagens de microscopia de interconexões reais.

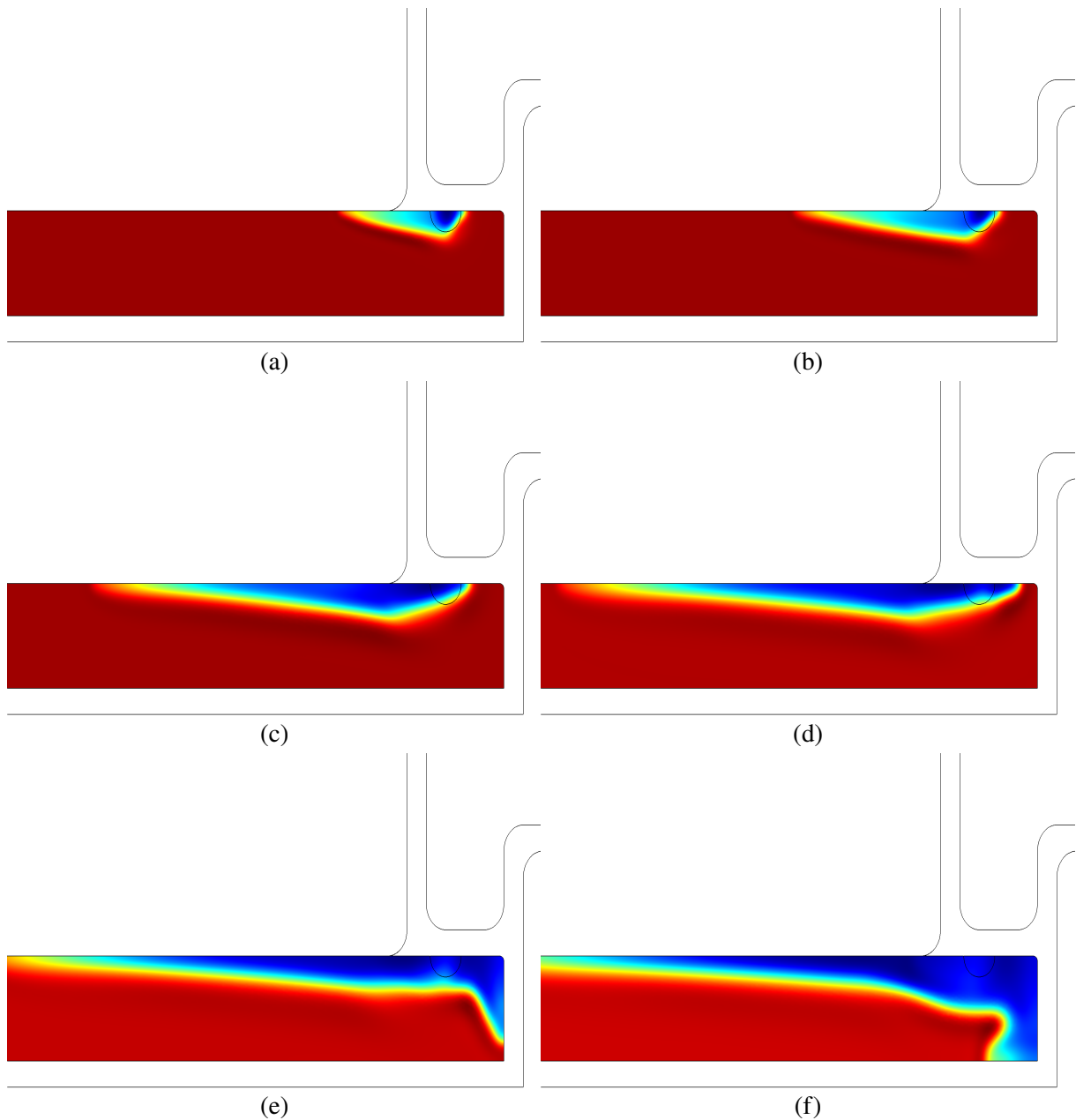


Figura 5.4: Crescimento de vazio de eletromigração a partir de posição inicial debaixo da via. (a) Com 875 horas. (b) Com 2700 horas. (c) Com 10000 horas. (d) Com 15800 horas. (e) Com 19400 horas. (f) Com 25000 horas de operação da interconexão.

<sup>2</sup>o que não foi levado em consideração na modelagem das simulações de fluxo

Para simular a evolução de vazios de eletromigração, é gerada uma distribuição espacial inicial para  $\phi$  definindo o metal e um vazio em determinada região. O parâmetro  $\phi$  é então submetido a evolução temporal sob a forma de Cahn-Hilliard - eq. (3.1) - com o fluxo da Figura 5.2 dentro do termo  $\vec{u}$  de acordo com as eqs. (3.17) e (3.18), o que faz a interface se deslocar na direção de entrada de vacâncias. Nas Figuras 5.4, 5.5 e 5.5 percebe-se que o crescimento é muito mais pronunciado pelas regiões de fluxo mais intenso de vacâncias - as superfícies Cu-SiN e Cu-TaN.

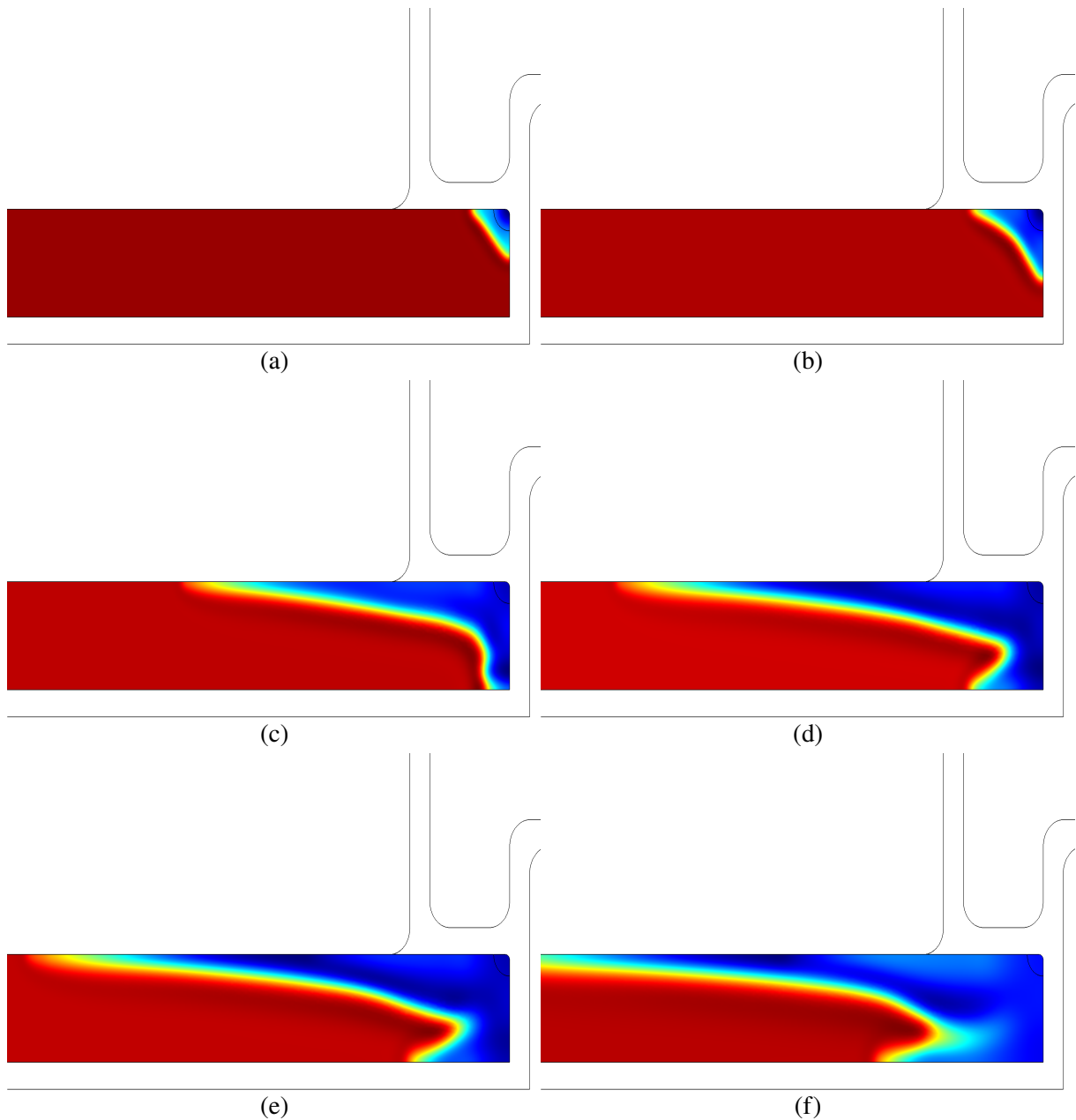


Figura 5.5: Crescimento a partir de posição inicial no canto superior direito. (a) Depois de 1000 horas. (b) Depois de 2700 horas. (c) Depois de 10000 horas. (d) Depois de 13800 horas. (e) Depois de 16600 horas. (f) Depois de 25000 horas de evolução temporal da equação de Cahn-Hilliard.

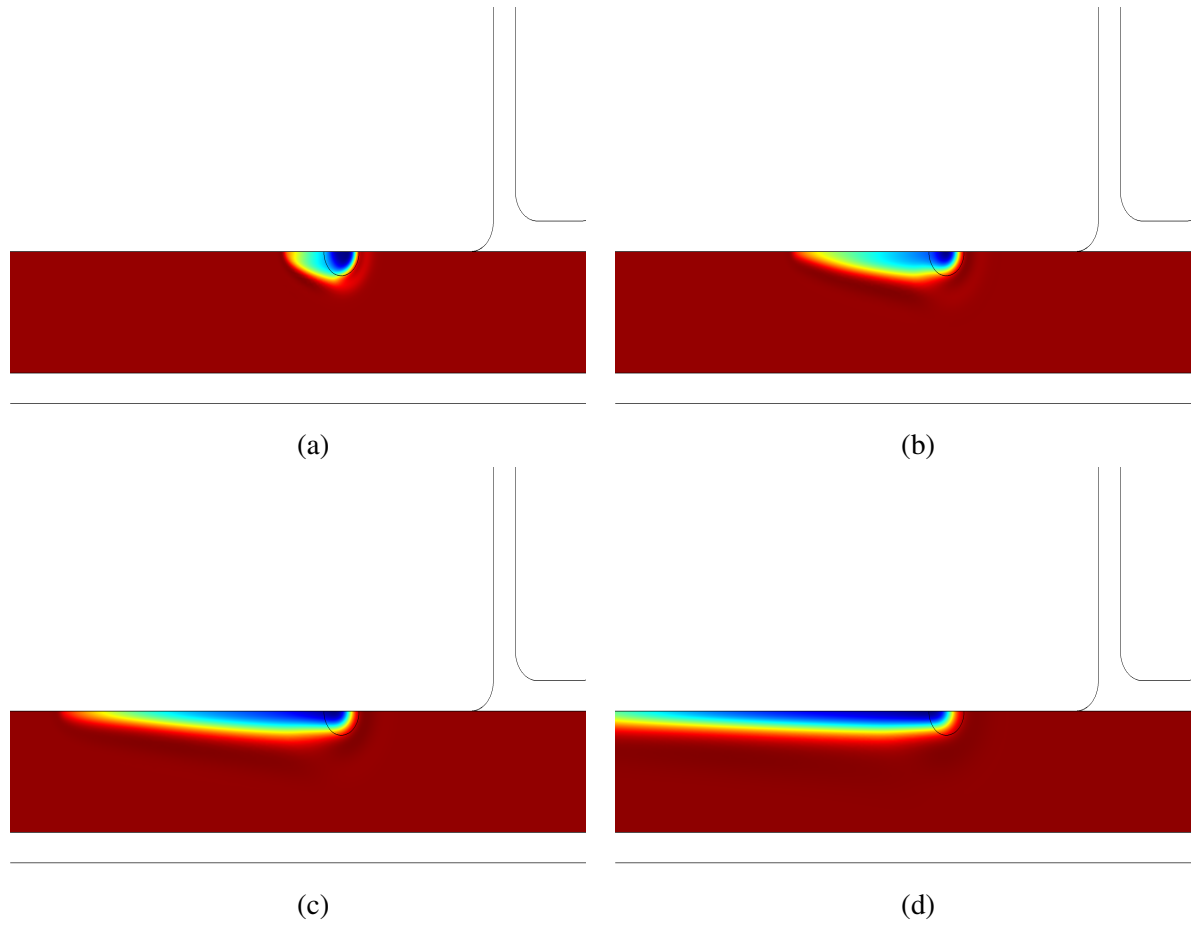


Figura 5.6: Crescimento a partir de posição inicial na superfície em contato com a capa. (a) Depois de 270 horas. (b) Depois de 1900 horas. (c) Depois de 5500 horas. Depois de 13800 horas de evolução temporal da eq. (3.1).

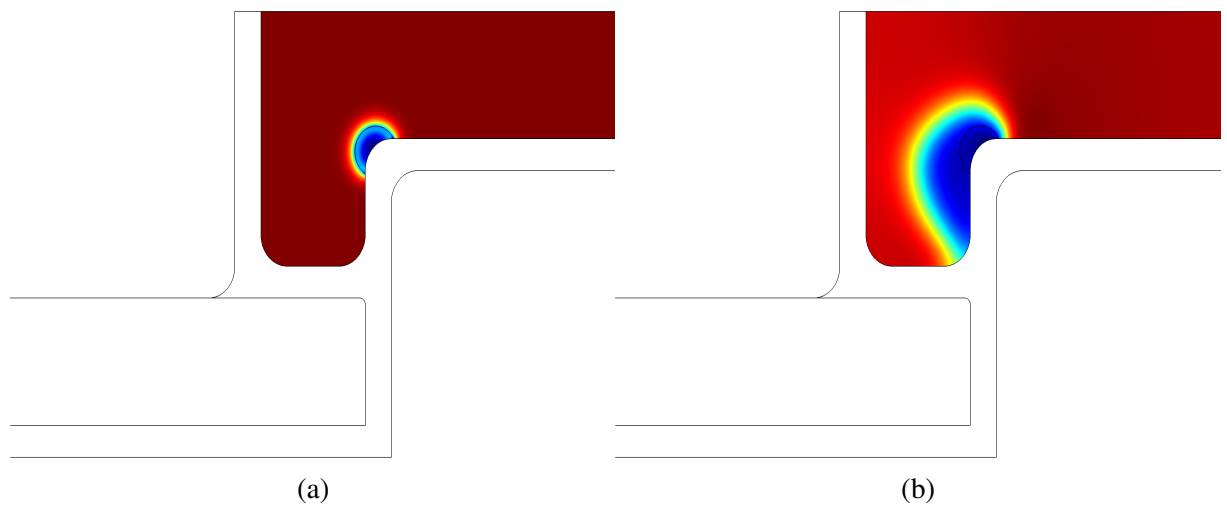


Figura 5.7: Crescimento a partir de posição inicial na transição entre a via e a interconexão de cima. (a) Em  $t=0$ . (b) Depois de 50000 horas de operação das interconexões.

Não é incomum aparecerem vazios no canto superior esquerdo da interconexão de cima [12]. Todavia, as simulações desse trabalho não verificaram crescimento significativo

mesmo após o tempo máximo simulado de 50000 horas de operação (Figura 5.8). Isso porque o fluxo vertical de vacâncias não foi suficiente para provocar crescimento na direção vertical - já que  $D_v^{TaN} < D_v^{cap}$  não se compensa o fluxo horizontal que está na direção oposta à direção de encontro com o vazio.

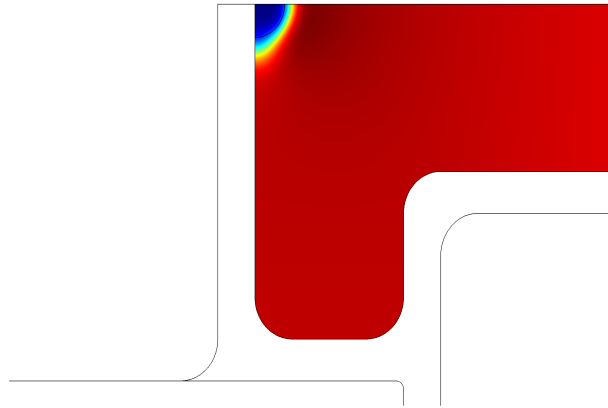


Figura 5.8: Vazio de eletromigração no canto superior esquerdo da interconexão de cima.

Sem aplicação de fluxos nos contornos policristalinos, nota-se claramente crescimentos muito mais pronunciados nas regiões mais suscetíveis aos transportes de massa - as superfícies Cu-capla e Cu-TaN.

A simulação da Figura 5.5 (vazio crescido a partir do canto superior direito) apresentou deterioração da interconexão similar à da Figura 5.4 (vazios inicialmente embaixo da via). Por não estar suficientemente perto dos fluxos nas superfícies Cu-TaN, a simulação da Figura 5.6 evidencia que não considerar os fluxos na microestrutura implica não se observar crescimento relevante na direção do interior do condutor. A curva na transição entre a via e a interconexão é uma região em que a divergência de fluxo é bastante relevante. De fato, a simulação de crescimento da Figura 5.7 apresentou aumento do vazio a partir dessa posição.

Tendo em vista o que esse trabalho propõe, para avaliação dos resultados é importante comparar as figuras de simulação com as imagens que mostram, na introdução, vazios de eletromigração reais.

#### DETERIORAÇÃO DA RESISTÊNCIA

Os gráficos na Figura 5.9 mostram o aumento da resistência elétrica total da geometria em relação à resistência total inicial. As simulações de evolução de vazios de eletromigração indicaram ocorrências de interconexões deterioradas após tempos de operação realísticos em relação a testes experimentais [11, 13], bem como ao senso comum sobre a durabilidade de bens de microeletrônica comerciais.

Acoplado a condutividade à distribuição espacial de  $\phi$  obteve-se o comportamento da resistência da interconexão nas simulações de crescimento a partir das posições iniciais embaixo da via (crescimento da Figura 5.4), canto superior direito (crescimento da Figura 5.5)

e transição via-interconexão superior (crescimento da Figura 5.7).

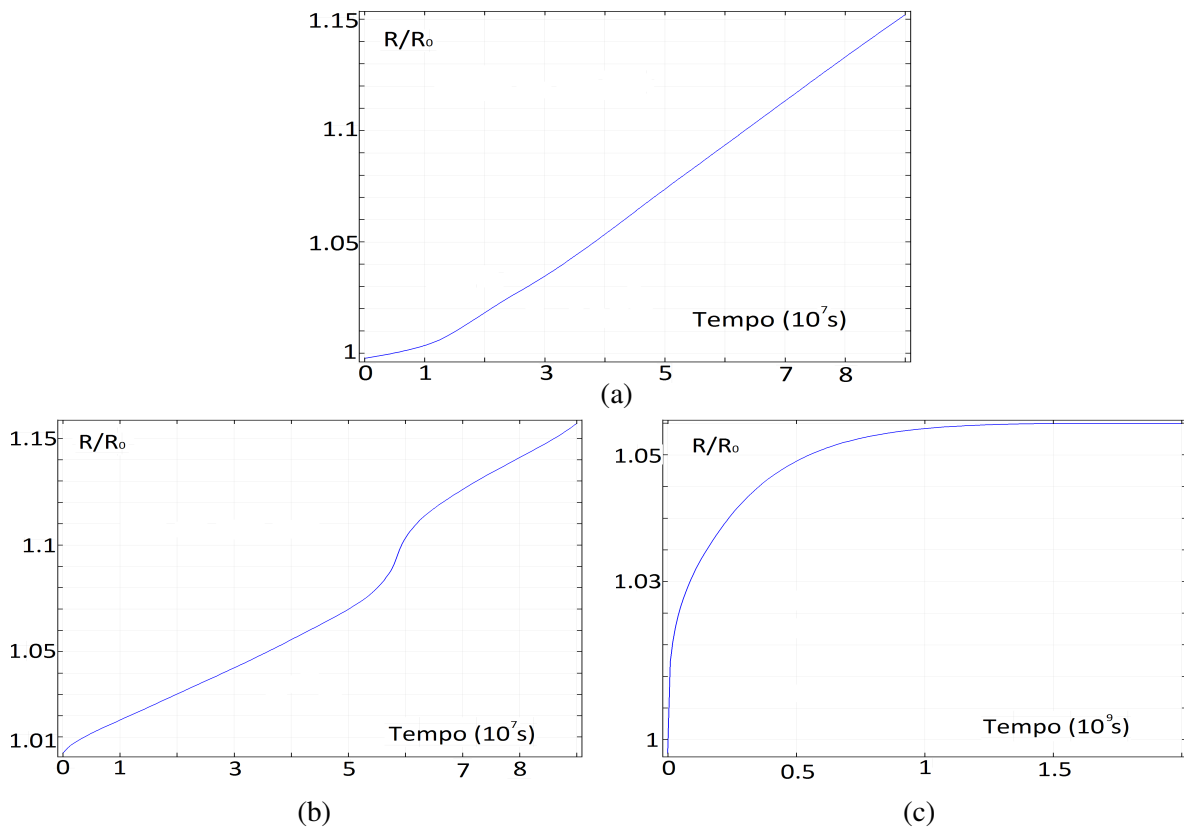


Figura 5.9: Deterioração da resistência em função do tempo de operação. (a) Vazio inicialmente embaixo da via. (b) Vazio inicialmente no canto superior direito. (c) Vazio inicialmente na transição via-interconexão.

As Figuras 5.9b (vazio inicialmente embaixo da via) e 5.9a (vazio inicialmente no canto superior direito) evidenciam que a interconexão se deteriora nos dois casos de forma similar até certo tempo. Na Figura 5.9a, o aumento na taxa  $\frac{dR}{dt}$  reflete o evento em que o vazio atinge a superfície oposta (inferior) da interconexão, o que acontece no primeiro caso apenas em um instante de tempo que não está contido nos eixos da Figura 5.9b. A Figura 5.9c explicita uma alta taxa de evolução da resistência, porque aquela região originalmente observa maior densidade de corrente, tendo portanto grande participação na transmissão de cargas entre a via e a interconexão de cima.

## 5.2.2 Tempo de falha

Tendo em vista o modelo da eq. (2.10), analisou-se o comportamento do tempo de falha em função da densidade de corrente em crescimentos simulados com o método desse trabalho. Para isso, foram aplicados diversos valores de  $\vec{j}$  entre 0.6 e 7  $MA/cm^2$  para promover crescimentos de vazios inicialmente no canto superior direito da linha (como na Figura 5.5). *TTF* apresentou o comportamento hiperbólico previsto na relação empírica da eq. (2.10). Na Figura 5.10a podemos ver o formato hiperbólico de *TTF* em função da densidade de corrente. Os logaritmos das grandezas apresentaram dispersão aparentemente linear, indicando



compatibilidade com o modelo empírico.

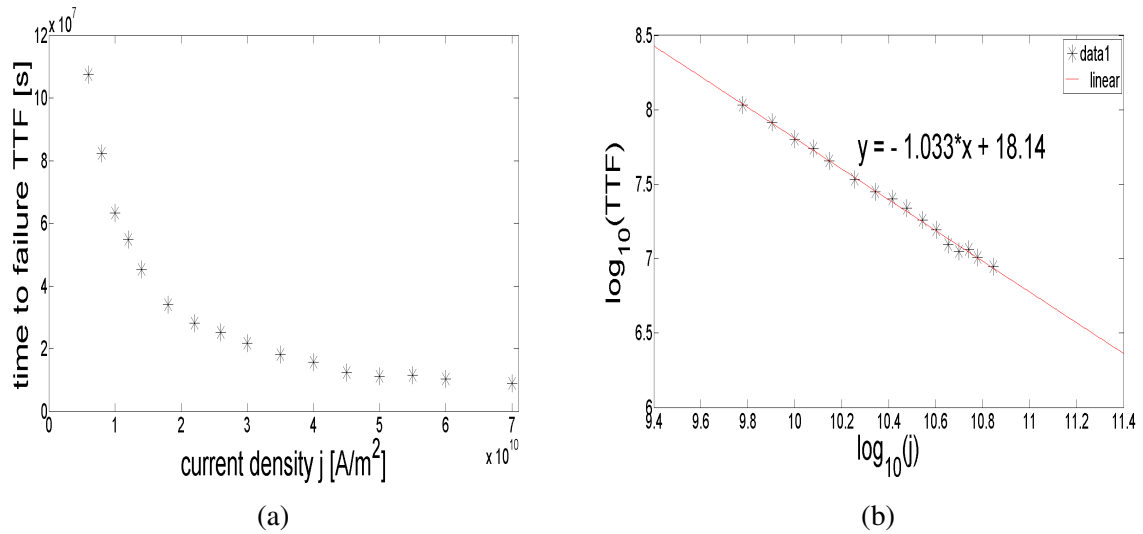


Figura 5.10: Comportamento do tempo de falha em simulações de crescimento de vazio com o método de interface difusa.

O ajuste linear da dispersão 5.10b retornou  $n = 1$ , que é o valor obtido experimentalmente para casos em que o vazio já está inicialmente em fase avançada de nucleação [40].

### 5.3 Movimento de advecção do vazio

Nas simulações de advecção está aplicado em  $\vec{u}$  somente os fluxos tangenciais  $\vec{J}_s$  de átomos na interface. As simulações evoluem a partir de um vazio semi-circular, indicado pelo contorno preto na parte superior das Figura 5.11. A Figura 5.11 não possui efeito de microestrutura, ela mostra o movimento básico de advecção - o vazio se desloca no sentido da corrente e seu formato muda levemente.

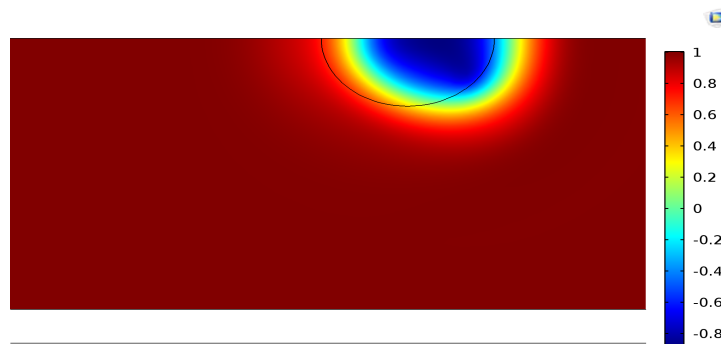


Figura 5.11: Movimento de advecção: o vazio se desloca levemente no sentido da corrente e altera levemente seu formato.

## 5.4 Adicionando as ponderações de microestrutura

### 5.4.1 Advecção com o fator $a$

Na simulação da Figura 5.12 multiplicou-se o fator  $a$  (eq. (2.11)) pela velocidade de convecção da interface. Considerou-se a microestrutura "tipo bambu"<sup>3</sup> - grãos aproximadamente verticais ( $\theta_{grain} = 90^\circ$ ) e com  $X_{size0} = Y_{size0} = h_w$ . Desse modo e com  $m = 10$  a velocidade de convecção da interface foi amplificada dez vezes no sentido vertical.

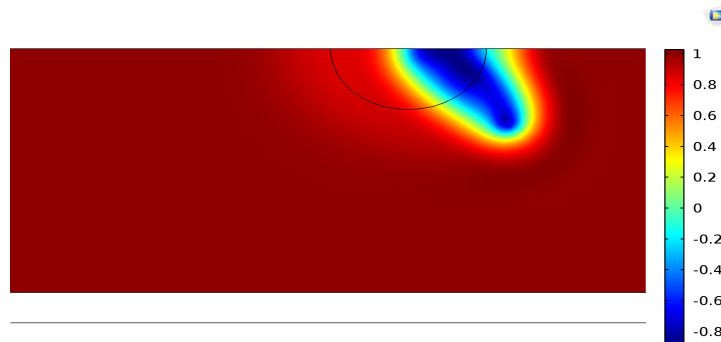


Figura 5.12: Advecção em microestrutura tipo bambu.

Na Figura 5.12 nota-se que o vazio tende a se rearranjar verticalmente, virtualmente entre o que seria a fronteira entre dois grãos. Este formato de vazio é bastante observado em microestruturas do tipo bambu e é conhecido como "falha de fenda transgranular"<sup>4</sup> [68].

### 5.4.2 A microestrutura implícita difusa

As Figuras 5.13, 5.14 e 5.15 mostram três microestruturas, elas foram geradas com  $X_{size0} = Y_{size0} = h_w$  (tipo bambu, Figura 5.13), com  $X_{size0} = Y_{size0} = h_w/2$  (Figura 5.14) ou com  $X_{size0} = Y_{size0} = h_w/3$  (Figura 5.15). Estas configurações serão denominadas "Microestrutura 1", "Microestrutura 2" e "Microestrutura 3", respectivamente.

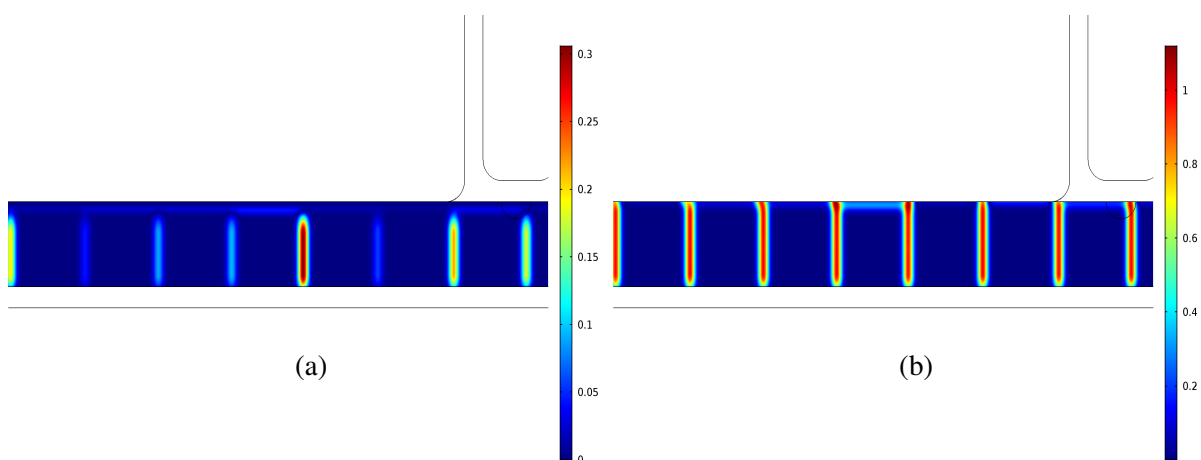
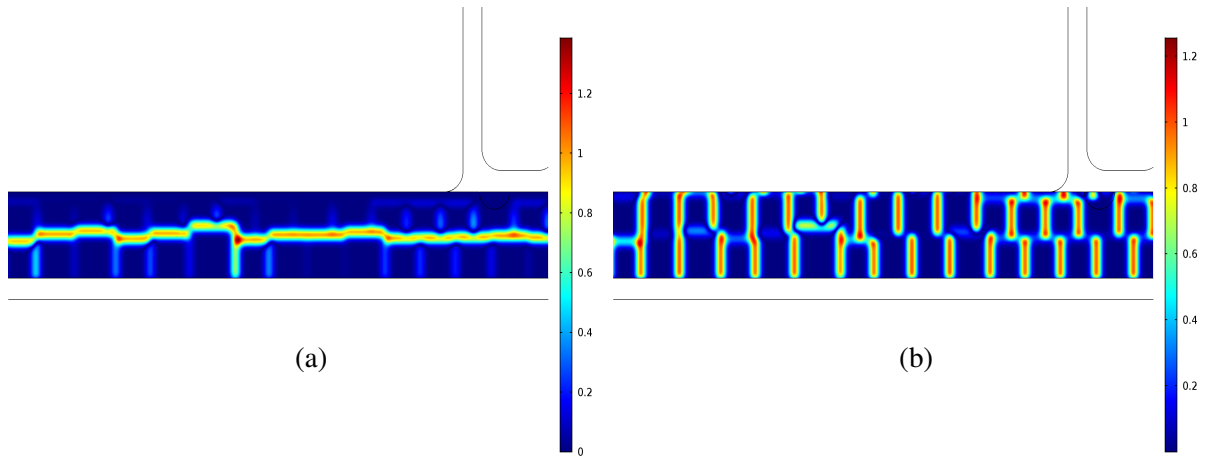
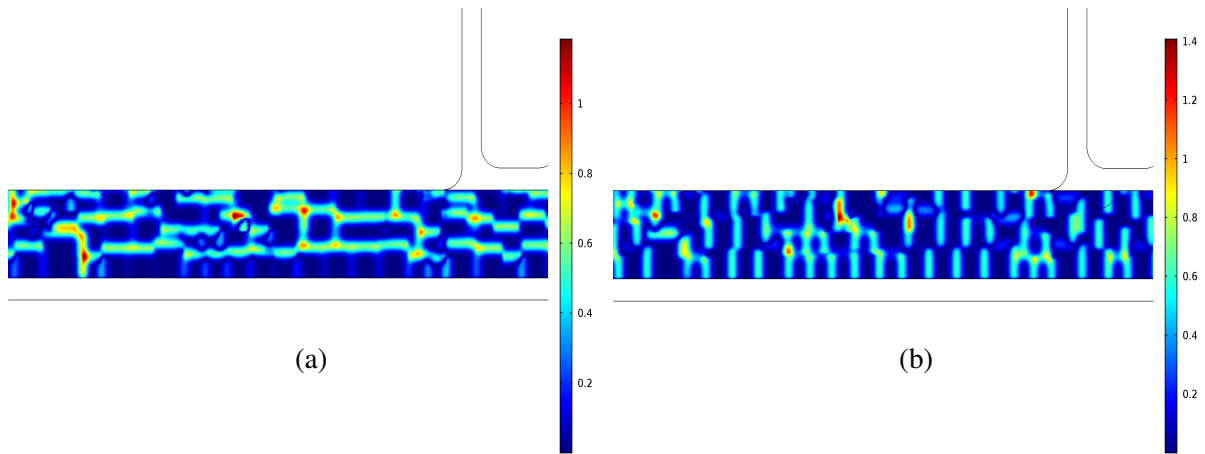


Figura 5.13: "Microestrutura 1". (a)  $G_x$ . (b)  $G_y$ .

<sup>3</sup>Estrutura comum no metal em interconexões antigas. Tradução própria do termo original - "bamboo-type".

<sup>4</sup>Tradução própria do termo original- *transgranular slit-like failure*.

Figura 5.14: "Microestrutura 2". (a)  $G_x$ . (b)  $G_y$ .Figura 5.15: "Microestrutura 3". (a)  $G_x$ . (b)  $G_y$ .

Em cada caso, para menores tamanhos médios de grãos, foram atribuídos maiores desvios padrões das funções aleatórias  $C_{X,Y}^{V,H}$ , o que está de acordo com o que é observado experimentalmente [12].

#### FLUXOS DE VACÂNCIA NOS CONTORNOS DE GRÃOS

Agora difusividades  $D_v^{g.b.}$  serão associadas aos contornos dos grãos como função das distribuições espaciais de  $G_x$  e  $G_y$ . Essas distribuições não definem fronteiras unidimensionais rígidas. Ao invés disso, o desvio padrão de  $g$  determina uma amplitude para as fronteiras. Isso favorece uma boa resolução de elementos finitos dentro delas e permite que se atribua uma distribuição espacial suave  $D_v^{g.b.}$ . Para automatizar ainda mais o método, definiu-se o desvio padrão de  $g$  como sendo uma função da espessura  $\pi\epsilon$  da interface, o que se mostrou conveniente para que o deslocamento da interface seja realístico no que se refere ao fluxo de vacâncias da fronteira para o vazio.

A quantificação da adesão entre duas paredes de grãos do metal é bastante incerta. O calor de ativação para quebra de ligações covalentes nessas regiões depende muito do arranjo

policristalino. O fluxo tangencial aos contornos de grãos foram simulados com

$$D_v^{cap} = 500 D_{self}^{Cu} , \quad (5.4)$$

relação estimada com base em dados experimentais [34].

Por causa da amplitude dos pulsos gaussianos, para microestruturas de grãos muito pequenos eventualmente pode haver sobreposição de fronteiras. Isso não é um problema, pois a difusividade aplicada a essas distribuições foi definida de tal forma que

$$|G_x| \geq 1 \vee |G_y| \geq 1 \Rightarrow D_v^{cap}(G_x, G_y) : \Leftrightarrow D_v^{g.b.} \Big|_{(1,1)} . \quad (5.5)$$

Agora todos os fluxos de vacâncias na interconexão já podem ser estabelecidos, combinando

$$\blacksquare D_v := \coprod_{cap; TaN; g.b.} \left\{ \blacksquare D_v(\vec{r}) = D_{self}^{Cu} \right\}^C \oplus \left\{ \blacksquare D_v(\vec{r}) = D_{self}^{Cu} \right\} \cdot D_{self}^{Cu} . \quad (5.6)$$

A Figura 5.16 apresenta os resultados das simulações de fluxos de vacâncias em todo o metal. As distribuições espaciais das difusividades estão devidamente atribuídas nas superfícies Cu-capa e Cu-TaN. Além disso, no interior do metal a difusividade de vacâncias está acoplada às distribuições espaciais de  $G_x$  e  $G_y$ .

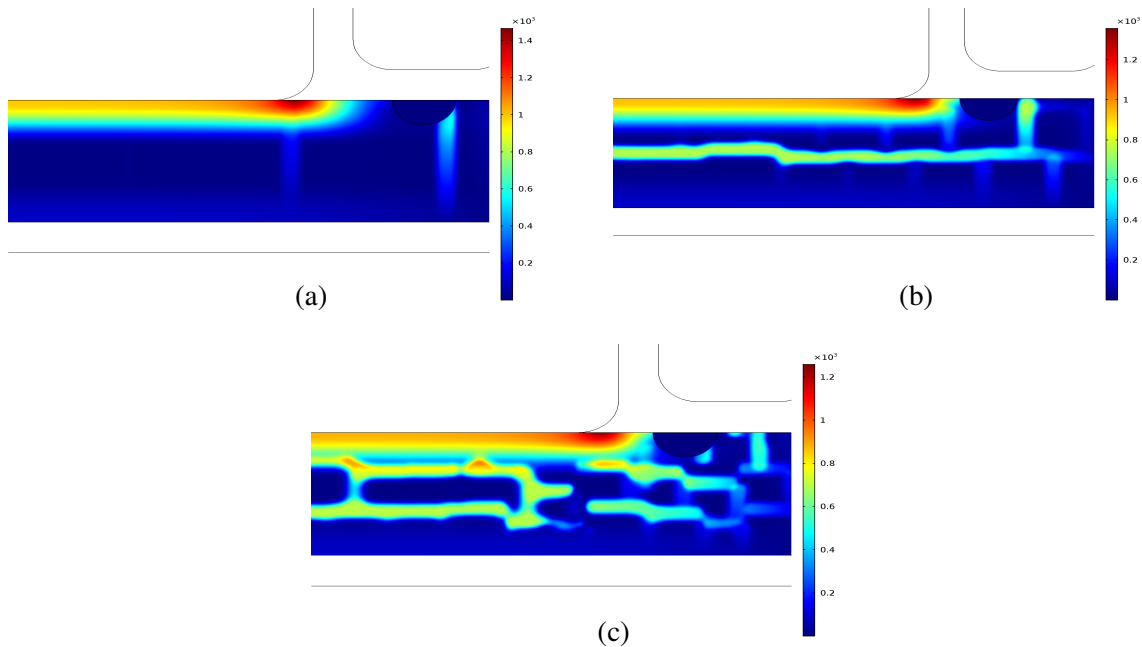


Figura 5.16: Fluxo total de vacâncias, em  $10^4 m^{-2} s^{-1}$ . (a) Na microestrutura 1. (b) Na microestrutura 2. (c) Na microestrutura 3.

Como esperado, a microestrutura 3 é a que sujeita a maior quantidade de migração de vacâncias. Com o fluxo da Figura 5.16c integramos mais uma vez o comportamento de  $c_v$ .

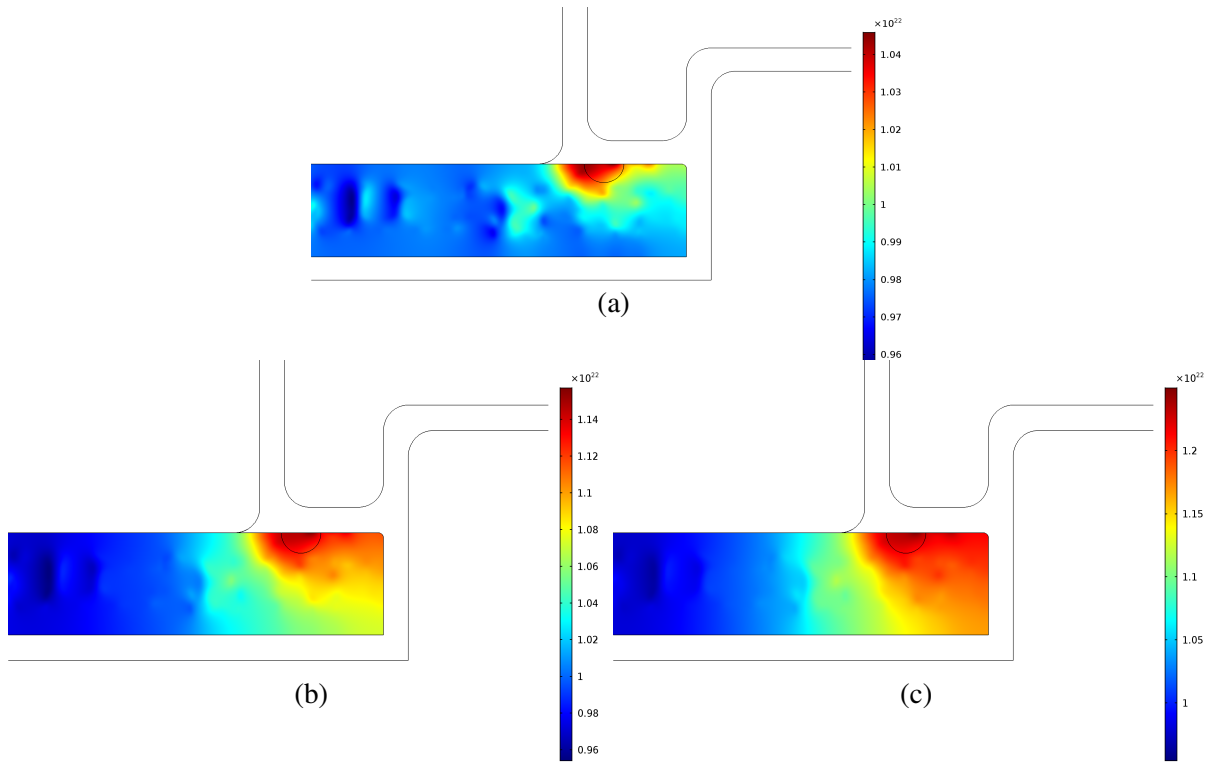


Figura 5.17: Concentrações de vacâncias, em  $m^{-3}$ , durante operação do condutor com microestrutura 3. (a) Depois de 2700 horas. (b) Depois de 22000 horas. (c) Depois de 44000 horas.

## 5.5 Crescimento de vazios de eletromigração em condutores policristalinos

A partir de um vazio inicialmente situado embaixo da via, foram simulados crescimentos sob efeito dos fluxos na microestrutura 1 (Figura 5.18), na microestrutura 2 (Figura 5.19) ou na microestrutura 3 (Figura 5.20). Os fluxos de vacâncias nas fronteiras entre grãos estão atribuídos à geometria através do método de microestrutura implícita difusa. Também nas superfícies Cu-capa e Cu-TaN, as difusividades estão devidamente aplicadas, de modo que toda eletromigração está aplicada a  $\vec{u}$  através de  $\vec{J}_v$  avaliado sob a configuração 5.6.

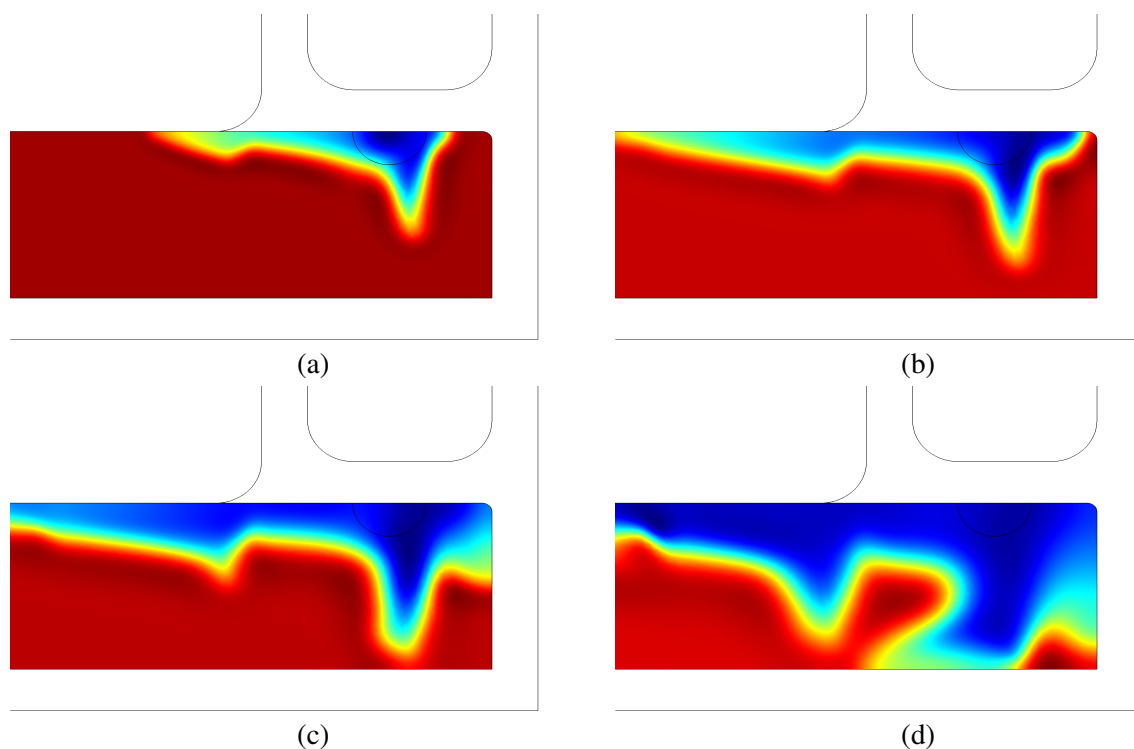


Figura 5.18: Evolução de um vazio de eletromigração em interconexão com microestrutura 1. (a) Com 833 horas de crescimento. (b) Com 2500 horas de crescimento. (c) Com 5500 horas de crescimento. (d) Com 13800 horas de crescimento.

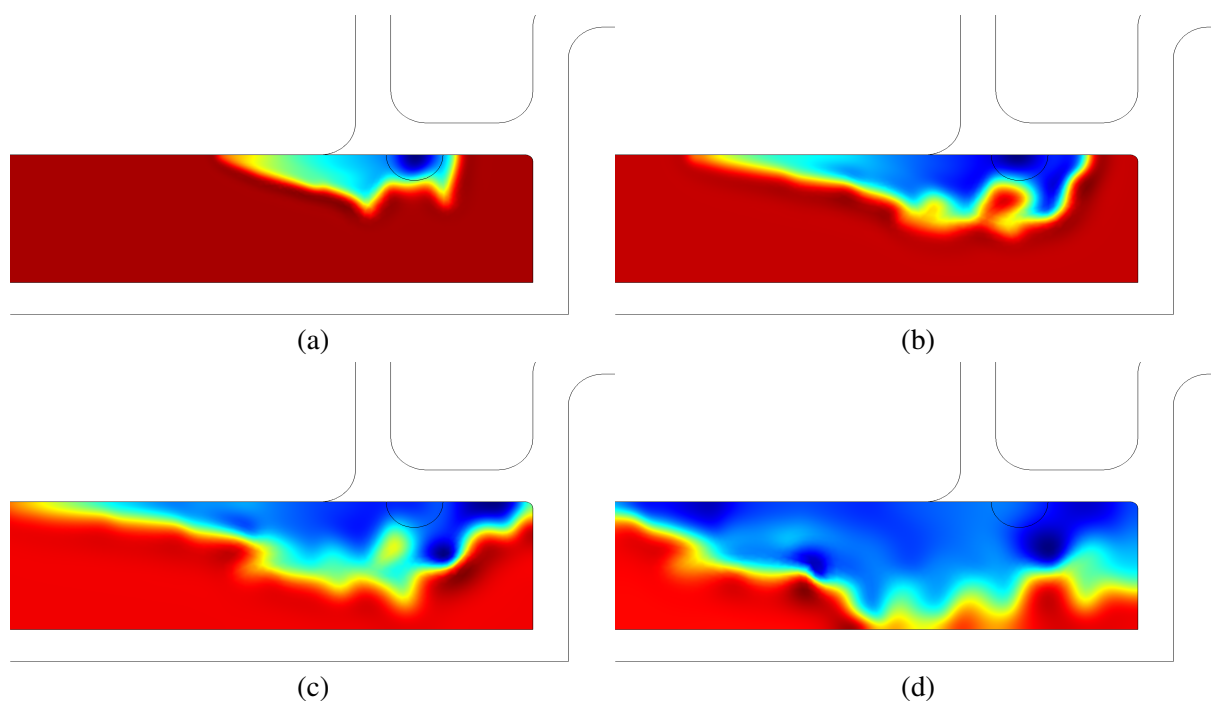


Figura 5.19: Evolução de um vazio de eletromigração em interconexão com microestrutura 2. (a) Com 833 horas de crescimento. (b) Com 2500 horas de crescimento. (c) Com 5500 horas de crescimento. (d) Com 13800 horas de crescimento.

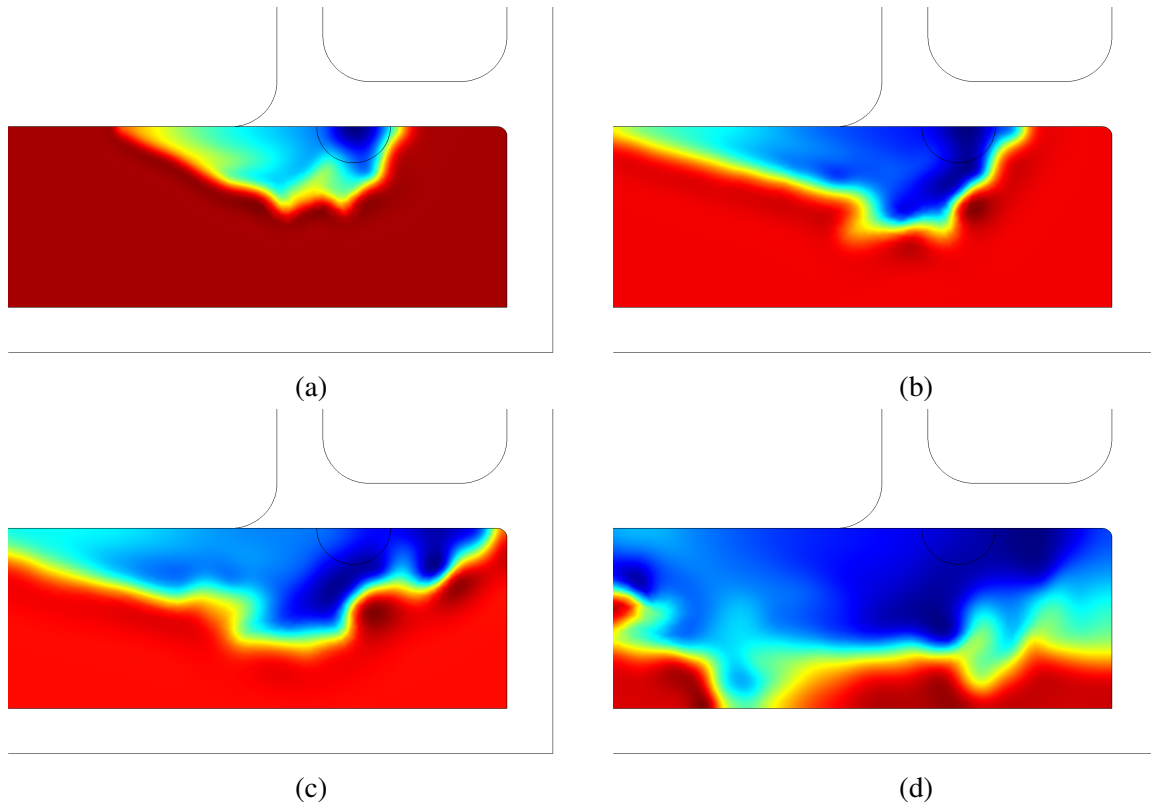


Figura 5.20: Evolução de um vazio de eletromigração em interconexão com microestrutura 3. (a) Com 833 horas de crescimento. (b) Com 2500 horas de crescimento. (c) Com 5500 horas de crescimento. (d) Com 13800 horas de crescimento.

O crescimento fica mais pronunciado nas regiões mais suscetíveis aos transporte de massa. Além das superfícies Cu-capa e Cu-TaN, agora as fronteiras entre grãos também contribuem com uma quantidade expressiva de  $\vec{J}_v$ , de modo que os formatos que os vazios adquirem têm correspondência evidente com as respectivas figuras de fluxo de cada microestrutura.

A aplicação das microestruturas implícitas difusas demandaram alto custo de processamento - quanto menor o tamanho médio de grãos, maior o tempo que a simulação demorou. É importante, portanto, aprimorar o método ou otimizar seu custo computacional.

## 5.6 Efeitos de espalhamento

As regiões previstas para intensificação de espalhamento de elétrons estão exibidas na Figura 5.21. O gradiente da cor vermelha indica a localização e a amplitude nos quais sugere-se que se aplique a eq. (2.23). O distúrbio localizado de resistividade indicado pela Figura 5.21 foi obtido dos estágios de evolução da Figura 5.20. Nota-se que o comprimento da região vermelha acompanha o aumento no comprimento do vazio, demonstrando o funcionamento do fator  $VL$  (eq. (2.24)).

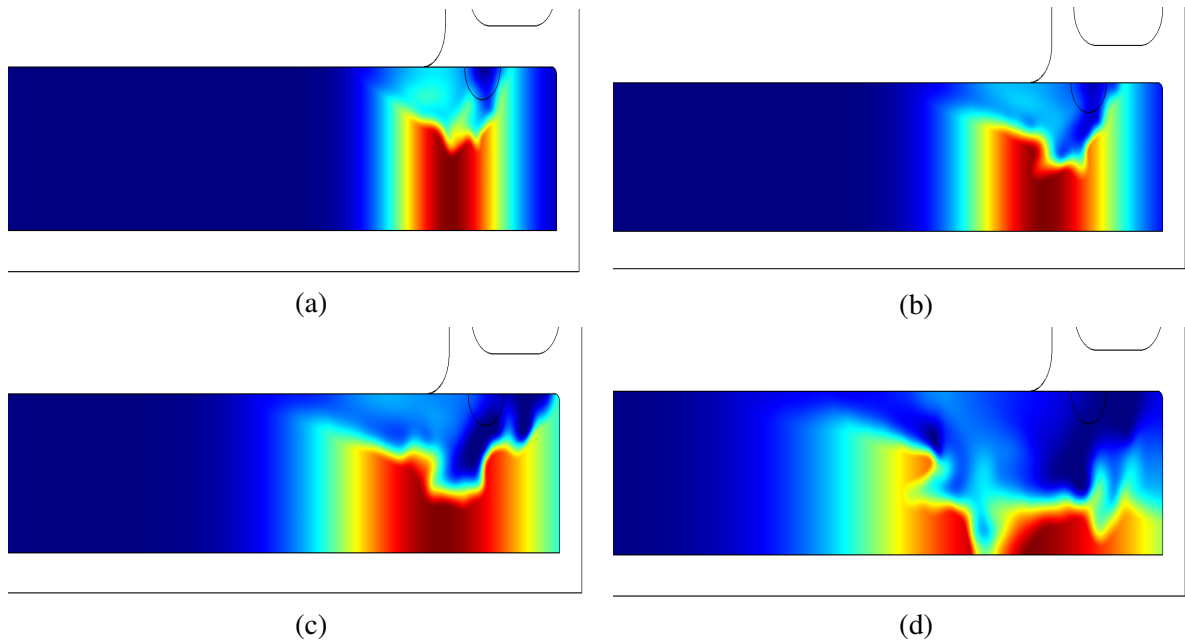


Figura 5.21: Regiões indicadas para aumento local de resistividade em função do espaço estreitado de condução.

A Figura 5.22 mostra a distribuição espacial da resistividade na interconexão, de acordo com a eq. (2.23) para um vazio em estágio avançado de crescimento. Essa figura foi obtida a partir do arranjo de  $\phi$  da Figura 5.20d (com microestrutura 3, depois de 13800 horas de crescimento).

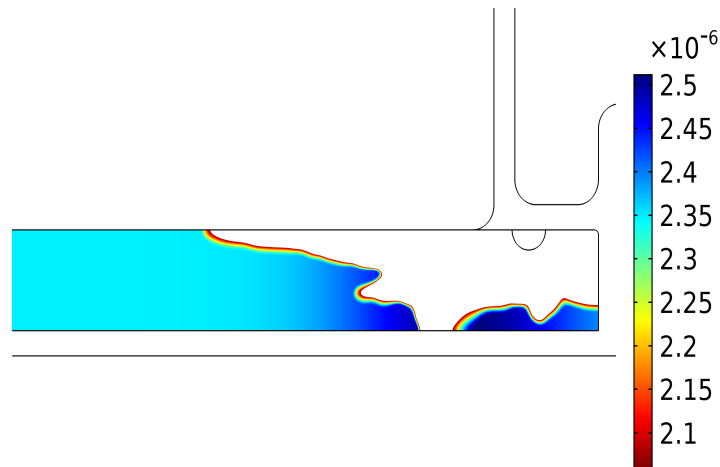


Figura 5.22: Variável espacial  $\rho$ , em  $\Omega \cdot cm$ , depois de 13800 horas de crescimento do vazio com microestrutura 3.

A eq. (2.20) foi usada para corrigir a resistividade da interconexão inferior, exceto na região embaixo do vazio, onde o azul está mais escuro devido ao método de intensificação local de resistividade.

Na região estrangulada pelo vazio, a condutividade se deteriora até um aumento final de 22% na resistividade local, como mostra a Figura 5.23.



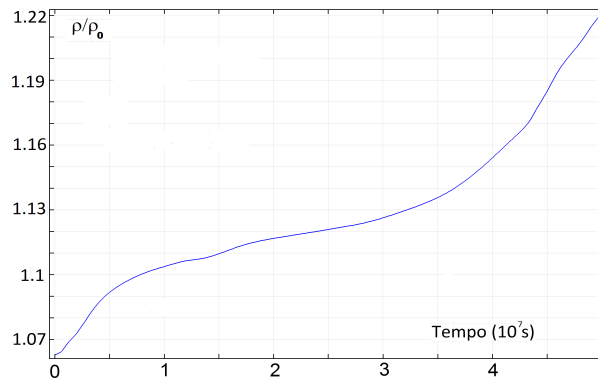


Figura 5.23:  $\rho/\rho_0$  na região de maior aumento da resistividade.

A taxa  $\frac{d\rho}{dt}$  que se observa pela Figura 5.23 mostra uma forte sensibilização da resistividade pelo afunilamento do caminho de condução.

O modelo usado para efeito de espalhamento é um ajuste de dados experimentais [50]. O ajuste matemático é gerado pelo comportamento de  $\rho$  em medições reais. Para isso, os experimentos são feitos com uma diversidade limitada de valores dos parâmetros da eq. (2.20). Como todo modelo matemático que descreve a natureza, a dedução teórica de (2.20) é baseada em argumentos físicos que não são válidos universalmente - as premissas não são ilimitadamente abrangentes. O formato da eq. (2.20) só é realístico dentro de um conjunto de intervalos de validade. Isso é, o modelo só é preciso se os valores dos parâmetros estiverem dentro de seus respectivos intervalos de validade.

O aumento local na resistividade observado na Figura 5.22 não é preciso, pois é avaliado em  $h_w \rightarrow y_{vlp}$ , que está muito fora do intervalo de validade de  $h_w$  no modelo da eq. (2.20). Modelos mais refinados de espalhamento podem ser encontrados em [25, 50, 51].

O contexto industrial e tecnológico da microeletrônica indica a necessidade de atenção para o ramo de confiabilidade das interconexões. Esse departamento, por sua vez, envolve uma cadeia de perspectivas sobre a deterioração por eletromigração.

O escalamento das interconexões exigirá mais precisão nas previsões de confiabilidade. A tecnologia planar de CIs demandará métodos de simulação eficientes e versáteis, para contemplar diretamente as essências dos fenômenos físicos nas interconexões futuras. A esse respeito, o método de interface difusa obteve êxito - a distribuição espacial de  $\phi$  fornece grande flexibilidade para acoplar os fenômenos físicos à interconexão.

Os métodos desenvolvidos nesse trabalho foram eficazes em aplicar aspectos muito relevantes para os próximos nós de tecnologia: a adesão da capa, a microestrutura e os efeitos de espalhamento. Os resultados obtidos são realísticos e todos os aspectos reclamados que influenciam a deterioração de interconexões foram simulados com níveis inéditos de precisão e detalhamento. Para aumento da complexidade do modelo, quaisquer outras físicas pertinentes podem ser acrescentadas de maneira análoga ao que foi desenvolvido aqui.

O método de controle da amplitude da interface contribuiu para a estabilidade da simulação mesmo para mobilidades baixas. Houve ganho de estabilidade também pela alteração "*shift*" da distribuição espacial na velocidade de convecção. A velocidade de convecção definida por extrusão espacial retornou o efeito esperado, mas o custo de processamento foi muito alto. Mesmo assim esse resultado é importante - ele corrobora o que foi declarado como motivação para rearranjar  $\vec{u}$ . Em todos os casos é importante atentar à fidedignidade da simulação.

As simulações de fluxo e concentração de vacâncias funcionaram perfeitamente. Os resultados de crescimento e advecção do vazio estão de acordo com a literatura, e o comportamento do tempo de falha nas simulações mostrou-se realístico.

O método de microestrutura implícita difusa revelou-se uma ferramenta de grande valor. As microestruturas são automaticamente geradas de forma totalmente aleatória e descrevem facilmente qualquer caso específico através da simples mudança de alguns parâmetros. As migrações de vacâncias nos contornos policristalinos simuladas com microestrutura implícita difusa mostraram que o método é estável e realístico.

Aplicou-se o efeito de espalhamento de forma mais específica no condutor. Foi analisado o aumento local da resistividade na interconexão. O crescimento do vazio pode causar estreitamento local na condução, criando uma espessura que chega a ser muito menor do que

o caminho livre médio dos elétrons em qualquer condutor, especialmente no cobre. Dessa forma, as colisões dos elétrons da corrente nas fronteiras é muito intensa, o que deve aumentar a resistividade muito além dos 122% observados. A alteração apropriada da resistividade local deve tornar mais realísticas as curvas de aumento da resistência - certamente esse método será de grande importância para se sofisticar os modelos futuros de confiabilidade.

Tudo indica que a ferramenta desenvolvida é capaz de contemplar diversos casos reais de interconexões atuais e futuras.

## Referências Bibliográficas

- [1] R. J. Baker, *CMOS: circuit design, layout, and simulation*, vol. 1. John Wiley & Sons, 2008.
- [2] L. J. Edgar, “Device for controlling electric current,” Mar. 7 1933. US Patent 1,900,018.
- [3] E. D. Le Roy and J. S. Kilby, “Component mounting for printed circuits,” July 12 1960. US Patent 2,945,163.
- [4] R. N. Noyce, “Semiconductor device-and-lead structure,” Apr. 25 1961. US Patent 2,981,877.
- [5] G. Moore, “Bcramping more components onto integrated circuits,[electronics, vol. 38,” *Apr*, vol. 19, pp. 114–117, 1965.
- [6] M. M. Waldrop, “The chips are down for moore’s law.,” *Nature*, vol. 530, no. 7589, pp. 144–147, 2016.
- [7] T. M. Conte, E. Track, and E. DeBenedictis, “Rebooting computing: New strategies for technology scaling,” *Computer*, vol. 48, no. 12, pp. 10–13, 2015.
- [8] J. L. Killesse, “Desenho científico 1.” - aquarela sobre papel 14,8 x 21 cm; Campinas, March 2017. Private communication, unpublished.
- [9] J. L. Killesse, “Desenho científico 2.” - aquarela sobre papel 14,8 x 21 cm; Campinas, March 2017. Private communication, unpublished.
- [10] A. Ceyhan, M. Jung, S. Panth, S. K. Lim, and A. Naeemi, “Impact of size effects in local interconnects for future technology nodes: A study based on full-chip layouts,” in *IEEE International Interconnect Technology Conference*, pp. 345–348, IEEE, 2014.
- [11] M. Hauschildt, M. Gall, S. Thrasher, P. Justison, L. Michaelson, R. Hernandez, H. Kawasaki, and P. Ho, “Analysis of electromigration statistics for cu interconnects,” *Applied physics letters*, vol. 88, no. 21, p. 211907, 2006.

- 
- [12] V. Sukharev, E. Zschech, and W. D. Nix, "A model for electromigration-induced degradation mechanisms in dual-inlaid copper interconnects: Effect of microstructure," *Journal of Applied Physics*, vol. 102, no. 5, p. 053505, 2007.
  - [13] B. Li, C. Christiansen, J. Gill, T. Sullivan, E. Yashchin, and R. Filippi, "Threshold electro-migration failure time and its statistics for cu interconnects," *Journal of applied physics*, vol. 100, no. 11, p. 114516, 2006.
  - [14] M. Lane, E. Liniger, and J. Lloyd, "Relationship between interfacial adhesion and electro-migration in cu metallization," *Journal of Applied Physics*, vol. 93, no. 3, pp. 1417–1421, 2003.
  - [15] G. K. Webb, "Integrated circuit (ic) pricing," *The Journal of High Technology Management Research*, vol. 5, no. 2, pp. 247–260, 1994.
  - [16] L.-C. Hsu, "Applying the grey prediction model to the global integrated circuit industry," *Technological Forecasting and Social Change*, vol. 70, no. 6, pp. 563–574, 2003.
  - [17] A. Gambardella and S. Torrissi, "Does technological convergence imply convergence in markets? evidence from the electronics industry," *Research policy*, vol. 27, no. 5, pp. 445–463, 1998.
  - [18] F. Taiariol, P. Fea, C. Papuzza, R. Casalino, E. Galbiati, and S. Zappa, "Life cycle assessment of an integrated circuit product," in *Electronics and the Environment, 2001. Proceedings of the 2001 IEEE International Symposium on*, pp. 128–133, IEEE, 2001.
  - [19] J. Bulow, "An economic theory of planned obsolescence," *The Quarterly Journal of Economics*, pp. 729–750, 1986.
  - [20] F. Malerba, R. Nelson, L. Orsenigo, and S. Winter, "'history-friendly' models of industry evolution: the computer industry," *Industrial and corporate change*, vol. 8, no. 1, pp. 3–40, 1999.
  - [21] B. T. Grimm, B. R. Moulton, and D. B. Wasshausen, "Information-processing equipment and software in the national accounts," in *Measuring Capital in the New economy*, pp. 363–402, University of Chicago Press, 2005.
  - [22] K. A. Asante, T. Agusa, C. A. Biney, W. A. Agyekum, M. Bello, M. Otsuka, T. Itai, S. Takahashi, and S. Tanabe, "Multi-trace element levels and arsenic speciation in urine of e-waste recycling workers from agbogbloshie, accra in ghana," *Science of the Total Environment*, vol. 424, pp. 63–73, 2012.
  - [23] O. Kraft and E. Arzt, "Electromigration mechanisms in conductor lines: void shape changes and slit-like failure," *Acta materialia*, vol. 45, no. 4, pp. 1599–1611, 1997.

- 
- [24] E. Kröner, “The differential geometry of elementary point and line defects in bravais crystals,” *International Journal of Theoretical Physics*, vol. 29, no. 11, pp. 1219–1237, 1990.
- [25] D. Josell, C. Burkhard, Y. Li, Y.-W. Cheng, R. Keller, C. Witt, D. Kelley, J. Bonevich, B. Baker, and T. Moffat, “Electrical properties of superfilled sub-micrometer silver metalizations,” *Journal of applied physics*, vol. 96, no. 1, pp. 759–768, 2004.
- [26] D. Giancoli, “Electric currents and resistance,” *Physics for Scientists and Engineers with Modern Physics, 4th edn. Prentice Hall: Upper Saddle River*, p. 658, 2009.
- [27] R. A. Serway, “Principles of physics . fort worth, texas; london: Saunders college pub,” tech. rep., ISBN 0-03-020457-7, 1998.
- [28] A. M. James and M. P. Lord, *Macmillan’s chemical and physical data*. Macmillan London, 1992.
- [29] V. Sukharev, “Simulation of microstructure influence on em-induced degradation in cu interconnects,” in *STRESS-INDUCED PHENOMENA IN METALLIZATION: Eighth International Workshop on Stress-Induced Phenomena in Metallization*, vol. 817, pp. 244–253, AIP Publishing, 2006.
- [30] M. F. Doerner and W. D. Nix, “Stresses and deformation processes in thin films on substrates,” *Critical Reviews in Solid State and Material Sciences*, vol. 14, no. 3, pp. 225–268, 1988.
- [31] E. Properties, “Young modulus for some materials,” *The Engineering ToolBox*, 2013.
- [32] R. P. Vinci, *Thermal strains and stresses in copper thin films and microelectronic interconnect structures*. PhD thesis, to the Department of Materials Science.Stanford University, 1994.
- [33] P. A. Flinn, “Measurement and interpretation of stress in copper films as a function of thermal history,” *Journal of Materials Research*, vol. 6, no. 07, pp. 1498–1501, 1991.
- [34] R. Keller, S. Baker, and E. Arzt, “Quantitative analysis of strengthening mechanisms in thin cu films: Effects of film thickness, grain size, and passivation,” *Journal of Materials Research*, vol. 13, no. 05, pp. 1307–1317, 1998.
- [35] E. Zielinski, R. Vinci, and J. Bravman, “Effects of barrier layer and processing conditions on thin film cu microstructure,” *Journal of electronic materials*, vol. 24, no. 10, pp. 1485–1492, 1995.

- 
- [36] D.-k. Kim, H. Lee, D. Kim, and Y. K. Kim, "Electrical and mechanical properties of tantalum nitride thin films deposited by reactive sputtering," *Journal of crystal growth*, vol. 283, no. 3, pp. 404–408, 2005.
- [37] O. Kononenko, V. Matveev, Y. I. Koval, S. Dubonos, and V. Volkov, "Electromigration in submicron wide copper lines," in *MRS Proceedings*, vol. 428, p. 61, Cambridge Univ Press, 1996.
- [38] R. Gonella, "Key reliability issues for copper integration in damascene architecture," *Microelectronic engineering*, vol. 55, no. 1, pp. 245–255, 2001.
- [39] E. Glickman and M. Nathan, "On the unusual electromigration behavior of copper interconnects," *Journal of applied physics*, vol. 80, no. 7, pp. 3782–3791, 1996.
- [40] R. De Orio, H. Ceric, and S. Selberherr, "Physically based models of electromigration: From black's equation to modern tcad models," *Microelectronics Reliability*, vol. 50, no. 6, pp. 775–789, 2010.
- [41] D. B. Butrymowicz, J. R. Manning, and M. E. Read, "Diffusion in copper and copper alloys. part i. volume and surface self-diffusion in copper," *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, vol. 2, no. 3, pp. 643–656, 1973.
- [42] D. N. Bhate, A. F. Bower, and A. Kumar, "A phase field model for failure in interconnect lines due to coupled diffusion mechanisms," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 50, no. 10, pp. 2057–2083, 2002.
- [43] A. A. Kelly and K. M. Knowles, *Crystallography and crystal defects*. John Wiley & Sons, 2012.
- [44] E. T. Ogawa, K.-D. Lee, V. A. Blaschke, and P. S. Ho, "Electromigration reliability issues in dual-damascene cu interconnections," *IEEE Transactions on Reliability*, vol. 51, no. 4, pp. 403–419, 2002.
- [45] L. Wilson, "International technology roadmap for semiconductors (itrs)," *Semiconductor Industry Association*, 2013.
- [46] L. Zhang, M. Kraatz, O. Aubel, C. Hennesthal, E. Zschech, P. S. Ho, E. Zschech, S. Ogawa, and P. S. Ho, "Grain size and cap layer effects on electromigration reliability of cu interconnects: Experiments and simulation," in *AIP Conference Proceedings*, vol. 1300, pp. 3–11, AIP, 2010.
- [47] C.-C. Yang, B. Li, F. Baumann, E. Huang, D. Edelstein, and R. Rosenberg, "Enhanced electromigration resistance through grain size modulation in copper interconnects," in *Semiconductor Technology International Conference (CSTIC), 2015 China*, pp. 1–5, IEEE, 2015.

- 
- [48] X. Federspiel, L. Doyen, and S. Courtas, "Use of resistance-evolution dynamics during electromigration to determine activation energy on single samples," *IEEE Transactions on Device and Materials Reliability*, vol. 7, no. 2, pp. 236–241, 2007.
  - [49] W. Steinhögl, G. Schindler, G. Steinlesberger, M. Traving, and M. Engelhardt, "Scaling laws for the resistivity increase of sub-100 nm interconnects," in *Simulation of Semiconductor Processes and Devices, 2003. SISPAD 2003. International Conference on*, pp. 27–30, IEEE, 2003.
  - [50] C. Durkan and M. Welland, "Size effects in the electrical resistivity of polycrystalline nanowires," *Physical review B*, vol. 61, no. 20, p. 14215, 2000.
  - [51] W. Steinhögl, G. Schindler, G. Steinlesberger, and M. Engelhardt, "Size-dependent resistivity of metallic wires in the mesoscopic range," *Physical Review B*, vol. 66, no. 7, p. 075414, 2002.
  - [52] K. Hinode, Y. Hanaoka, K.-i. Takeda, and S. Kondo, "Resistivity increase in ultrafine-line copper conductor for ulsis," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 40, no. 10B, p. L1097, 2001.
  - [53] W. Steinhögl, G. Schindler, G. Steinlesberger, M. Traving, and M. Engelhardt, "Comprehensive study of the resistivity of copper wires with lateral dimensions of 100 nm and smaller," *Journal of Applied Physics*, vol. 97, no. 2, p. 023706, 2005.
  - [54] W. Besling, V. Arnal, J. Guillaumond, C. Guedj, M. Broekaart, L. Chapelon, A. Farcy, L. Arnaud, and J. Torres, "Integration of ald tan barriers in porous low-k interconnect for the 45 nm node and beyond; solution to relax electron scattering effect," in *Electron Devices Meeting, 2004. IEDM Technical Digest. IEEE International*, pp. 325–328, IEEE, 2004.
  - [55] K. Fuchs, "The conductivity of thin metallic films according to the electron theory of metals," in *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 34, pp. 100–108, Cambridge Univ Press, 1938.
  - [56] P. Kapur, J. P. McVittie, and K. C. Saraswat, "Technology and reliability constrained future copper interconnects. i. resistance modeling," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 49, no. 4, pp. 590–597, 2002.
  - [57] A. Mayadas and M. Shatzkes, "Electrical-resistivity model for polycrystalline films: the case of arbitrary reflection at external surfaces," *Physical review B*, vol. 1, no. 4, p. 1382, 1970.



- 
- [58] M. Lin and A. Oates, "Ac and pulsed-dc stress electromigration failure mechanisms in cu interconnects," in *2013 IEEE International Interconnect Technology Conference-IITC*, 2013.
  - [59] B. Liew, N. Cheung, and C. Hu, "Electromigration interconnect lifetime under ac and pulse dc stress," in *Reliability Physics Symposium, 1989. 27th Annual Proceedings., International*, pp. 215–219, IEEE, 1989.
  - [60] C. Pan and A. Naeemi, "A proposal for a novel hybrid interconnect technology for the end of roadmap," *IEEE Electron Device Letters*, vol. 35, no. 2, pp. 250–252, 2014.
  - [61] J. W. Cahn and J. E. Hilliard, "Free energy of a nonuniform system. i. interfacial free energy," *The Selected Works of John W. Cahn*, pp. 29–38, 2013.
  - [62] P. Yue, J. J. Feng, C. Liu, and J. Shen, "A diffuse-interface method for simulating two-phase flows of complex fluids," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 515, pp. 293–317, 2004.
  - [63] P. Yue, C. Zhou, J. J. Feng, C. F. Ollivier-Gooch, and H. H. Hu, "Phase-field simulations of interfacial dynamics in viscoelastic fluids using finite elements with adaptive meshing," *Journal of Computational Physics*, vol. 219, no. 1, pp. 47–67, 2006.
  - [64] H. S. Fogler. "Comsol Multiphysics", COMSOL Inc. [br.comsol.com](http://br.comsol.com).
  - [65] M. Mahadevan and R. M. Bradley, "Phase field model of surface electromigration in single crystal metal thin films," *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 126, no. 3, pp. 201–213, 1999.
  - [66] C. M. Elliott and Z. Songmu, "On the cahn-hilliard equation," *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, vol. 96, no. 4, pp. 339–357, 1986.
  - [67] X. Federspiel, D. Ney, L. Doyen, and V. Girault, "Dynamics of resistance evolution during electromigration," in *2006 IEEE International Integrated Reliability Workshop Final Report*, pp. 24–27, IEEE, 2006.
  - [68] W. Wang, Z. Suo, and T.-H. Hao, "A simulation of electromigration-induced transgranular slits," *Journal of applied physics*, vol. 79, no. 5, pp. 2394–2403, 1996.

## Apêndice

### **-Trabalho apresentado em congresso e publicado-**

O seguinte trabalho foi apresentado em congresso e publicado antes da redação dessa dissertação.

- Queiroz, L. M. G. M., and R. L. de Orio. "Diffuse interface modeling for electromigration induced void growth." *Microelectronics Technology and Devices (SBMicro)*, 2016 31st Symposium on. IEEE, 2016.

# Diffuse Interface Modeling for Electromigration Induced Void Growth

L. M. G. M. Queiroz and R. L. de Orio

Semiconductors, Instruments and Photonics Dept. (DSIF)

School of Electrical and Computer Engineering (FEEC), University of Campinas (UNICAMP)

Av. Albert Einstein 400 – Cid. Univ. Zeferino Vaz, 13083-852 Campinas – SP, Brazil

leonardoqz@gmail.com

**Abstract**— Modeling and simulation of the temporal evolution of electromigration voids are critical to evaluate the reliability of interconnects of modern integrated circuits. In this work, the diffuse interface model is applied to investigate two different mechanisms of the void evolution due to electromigration. Two-dimensional numerical simulations have been performed and interconnect resistance increase has been monitored. The results recovered the main features of the electromigration induced failure observed in experiments.

**Keywords**—electromigration, diffuse interface, reliability, microelectronic interconnection.

## I. INTRODUCTION

Following the downscaling of devices, the dimensions of the interconnects of integrated circuits (ICs) have been shrunk [1]. Consequently, the relevance of electromigration (EM) phenomena among reliability issues have increased [1, 3–6].

The development of fatal voids, which leads to a large resistance increase or even completely sever the interconnect line, is the ultimate cause for the EM induced failure. Thus, it is crucial to understand the mechanisms driving the evolution of the void. In this way, proper models for the time-to-failure (TTF) and parameter extraction can be inferred.

This work introduces the diffuse interface model for numerical simulation of the void evolution mechanisms. Two-dimensional simulations are performed to investigate the advection and the growth of a void in a Cu line of the dual-damascene technology.

## II. ELECTROMIGRATION MODELING

For modeling the EM induced void development, there are two main driving forces for material transport that must be considered. The first one is related to the component of the electric field tangent to the void surface, which drives atoms of the material along the surface, causing the void to deform [1,3,8]. This corresponds to an advection term. The other driving force is the gradient of surface curvature [2,3,7]. Considering the above mechanisms, the normal velocity of the void surface is [3]

$$v_n = -\nabla \cdot \vec{J}_s - j_{nv} \quad (1)$$

$$\vec{J}_s = -\frac{D_s \delta_s}{kT} \left[ -\Omega \gamma_s \nabla_s \kappa + e |Z_s^*| \vec{E}_s \right],$$

where  $J_s$  is the volumetric flux along the surface,  $j_{nv}$  is a transfer flux between the void surface and its surroundings,  $D_s$  is the atomic diffusivity on the surface,  $\delta_s$  is the surface thickness,  $\Omega$  is the atomic volume,  $\gamma_s$  is the surface free energy,  $\nabla_s \kappa$  denotes the gradient of curvature along the surface,  $e$  is the

elementary charge,  $Z_s^*$  is the effective charge number,  $E_s$  is the electric field tangential to the void surface, and  $kT$  has its usual meaning.

Vacancies throughout the crystal lattice of the material are also transported by the electric field [12]. Vacancies move through the line and eventually accumulate in the void, which was itself formed by nucleation of those vacancies. Consequently, the void grows.

## III. THE DIFFUSE INTERFACE MODEL

EM induced void evolution is a moving boundary problem. Therefore, numerical methods and special techniques for tracking the void are necessary.

The diffuse interface method uses a spatial phase field variable  $\phi$  to describe two different domains, the metal bulk and the void. The phase field parameter varies continuously from -1 to +1, where  $\phi = +1$  defines the bulk,  $\phi = -1$  the void, and the region where  $-1 < \phi < +1$  corresponds to a diffuse interface of finite thickness, which is a representation of the void surface. The evolution of the phase field is governed by the Cahn-Hilliard equation [2,7]

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \phi = \gamma \nabla^2 G \quad (2)$$

where  $u$  is the velocity field for the advection,  $\gamma$  is the mobility, and  $G$  is the chemical potential.

The main advantage of the phase field method is that the void surface is implicitly determined, therefore avoiding the computationally “expensive” routines to track and re-mesh the void surface.

## IV. SIMULATIONS AND RESULTS

Eq. (1) is implemented in Comsol Multiphysics™. Its “Phase Field” module [7] solves the Cahn-Hilliard equation (2) to determine the phase field parameter evolution.

It is interesting to compare the results when using the diffuse interface method for the void evolution under advection only or for the growth mechanism alone. In this way, it is possible to investigate and understand the contribution of each effect for driving the void evolution. From the material point of view, advection dominates when the surface diffusivity is much higher than the bulk one. In the opposite case, i.e. for bulk diffusivity much higher than the surface one, the growth mechanism dominates.

Fig. 1 shows the two-dimensional Cu dual-damascene interconnect structure used in the simulations. The phase field parameter is also shown, from where one can visualize the initial position of the void.



Fig. 1. Interconnect structure, formed by a Cu metal line and TaN barrier layer. The initial position of the void is shown. The phase field variable defines the bulk (red), the void (blue) and the interface (color gradient).

#### A. Void Advection

Here, simulations have been performed considering only the advection mechanism on the void evolution. From the initial void in the structure (Fig. 1), the development of the void is depicted in Fig. 2.

The line is stressed at a high current density flowing from left to right. As a consequence, surface atoms migrate from the right to the left edge of the void, leading to the void deformation as shown in Fig. 2. One can see that the depletion of atoms on the right border makes the void to elongate and develop some kind of corner (although smooth), while material accumulation causes surface shrinkage on the left.

Fig. 3 shows the  $x$  (horizontal) and  $y$  (vertical) components of the atomic flux on the void surface for the void shape of Fig. 2. At the aforementioned corner of the void, a larger magnitude of the horizontal flux component is seen. This is expected as the current density around this point is the highest. Regarding the vertical component of the flux, its distribution as shown in Fig. 3(b) is consistent with the void shape of Fig. 2. Here, a larger positive value at the right edge, close to the corner, is responsible for the vertical growth observed at this region. On the other hand, a negative value at the left edge develops, indicating the tendency of surface shrinkage in this region.

#### B. Void Growth

In order to observe the growth of the void, the vacancy flux components due to electromigration itself and diffusion through the bulk of the metal line have been implemented.

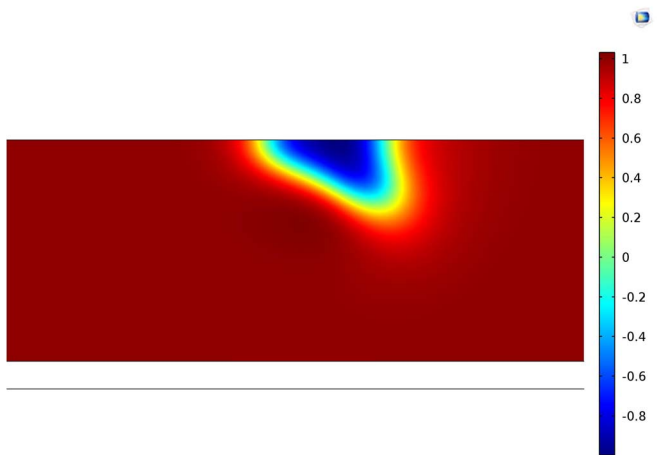
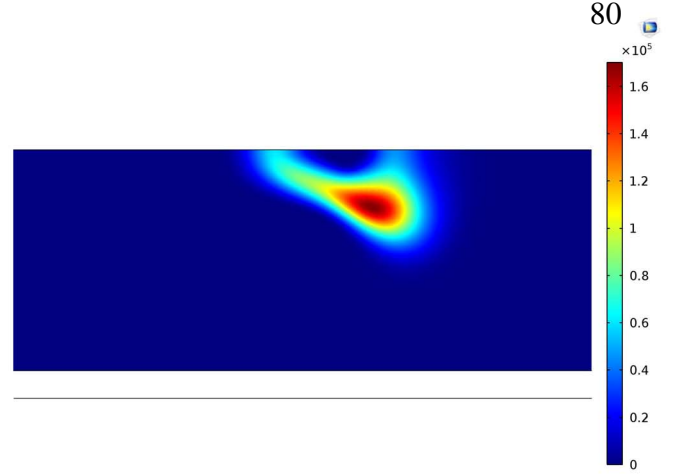
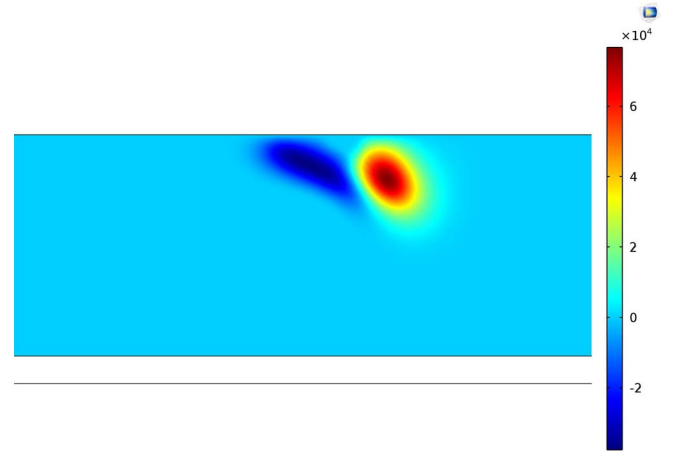


Fig. 2. Phase field parameter describing the void evolving under eq. (2) with the physics of advection only.



(a)



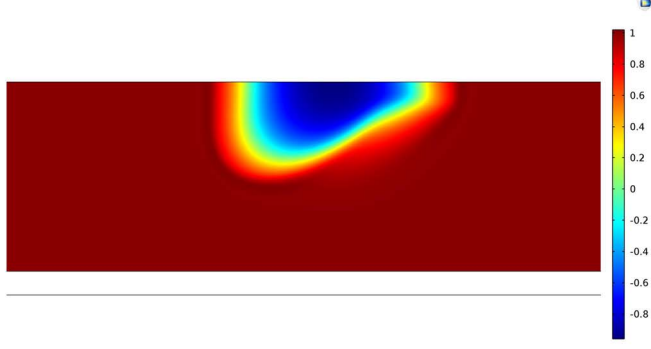
(b)

Fig. 3. (a) Horizontal and (b) vertical components of the atomic flux along the surface of the void shown in Fig. 2.

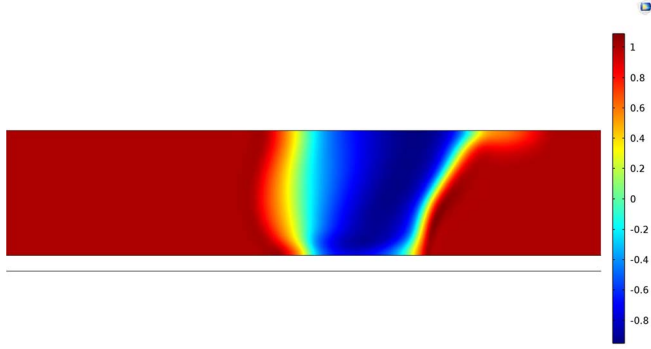
Therefore, the flux is proportional to the electric field and the vacancy concentration gradient [1]. This flux feeds the void with vacancies, being responsible for its growth, as shown in Fig. 4. The components of the vacancy flux through the metal bulk corresponding to the void of Fig. 4(a) are depicted in Fig. 5.

Fig. 4 shows a typical growth observed in electromigration experiments. The void grows vertically through the metal until it reaches the TaN barrier layer at the bottom of the line, as presented in Fig. 4(b). From this point on, the void boundaries grow along the Cu line, as shown in Fig. 4(c), and such growth process is commonly known as edge displacement.

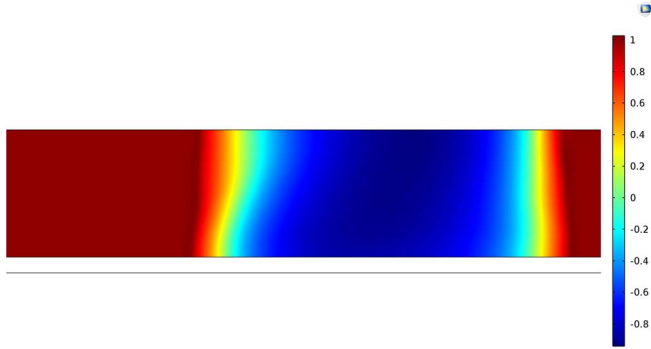
The void area and the resistance of the interconnect line during the growth process shown in Fig. 4 is presented in Fig. 6(a) and Fig. 6(b), respectively. It is interesting to note that the resistance increase is initially small and this happens until the point where the void spans the line thickness. As soon as the void reaches the barrier layer, a fast and large resistance increase occurs. Such a behavior is also observed in EM experiments.



(a)



(b)



(c)

Fig. 4. Different stages of the void growth. At (a) the typical configuration of a void as it accumulates vacancies coming from the left. Furthermore, from (b) to (c), the void got so big inside the interconnection that the edge of the line is been displaced.

The magnitude of the current density has an important impact on the shape of the void. This is shown in Fig. 7. That means that the edge displacement starts at different locations and at different times. If that's so, it is crucial that the previsions account the change of behavior of the time evolution of void area and line resistance.

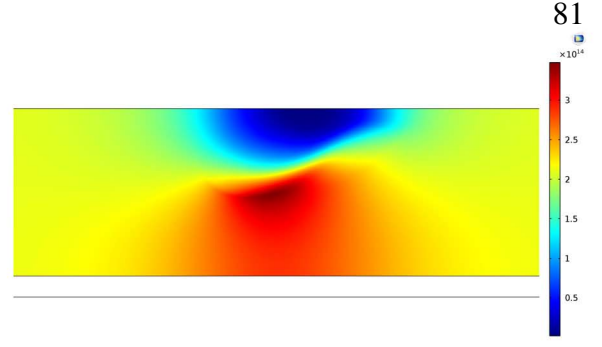
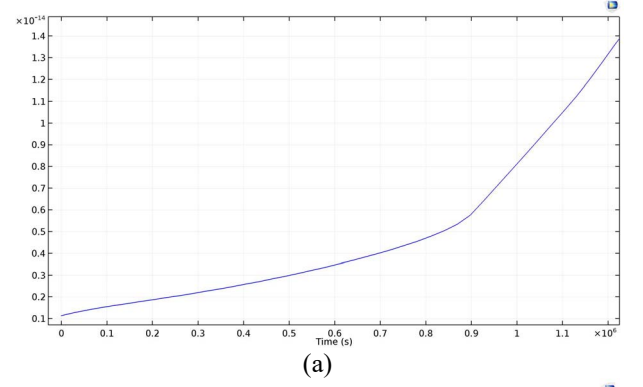
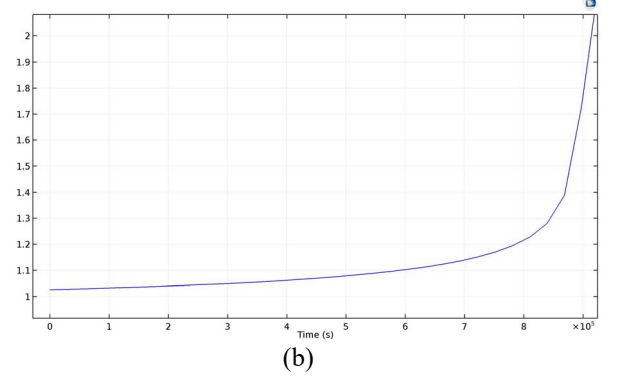


Fig. 5. Horizontal (a) component of the flux of vacancies vacancies around the void at the moment of figure 4(a).



(a)



(b)

Fig. 6. Evolution of the void area (a) and relative resistance (b) of the interconnect over the time of the growing shown in figure 4. The changes of both temporal derivatives at around  $8 \times 10^5$  s follows the beginning of the edge displacement stage.

## V. TIME TO FAILURE

Typically, it is considered that an interconnect “fails” when the resistance increases by 10% [5]. The time to failure (TTF) is generally expressed by Black’s equation [1]

$$TTF = \frac{A}{j^n} \exp\left(\frac{E_a}{kT}\right), \quad (3)$$

where  $A$  is a material dependent parameter,  $j$  is the current density,  $n$  is the current exponent, and  $E_a$  is the activation energy of the failure mechanism. Eq. (3) indicates that the time

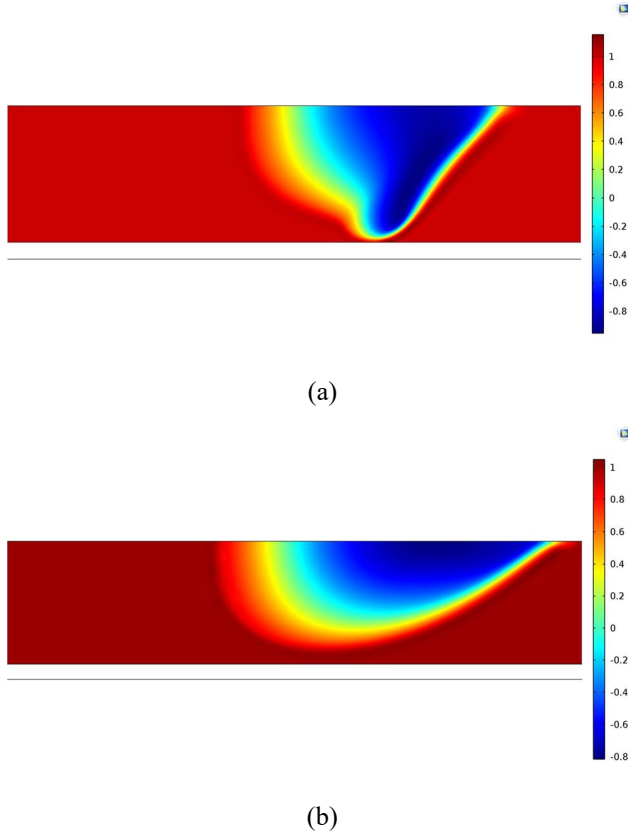


Fig. 7. Impact of the current density on the void shape. (a)  $j = j_0$ . (b)  $j = 2j_0$ .

to failure decreases as the current density increases. Fig. 8 shows the simulated TTF for different values of current density. In accordance to (3), the larger the current, the shorter is the interconnect TTF.

## VI. CONCLUSION

The diffuse interface avoids abrupt changes on material properties and other discontinuities on the relevant physics at the interface, thus being an efficient tool to simulate electromigration induced void evolution phenomena.

Void evolution due to advection and growth have been simulated separately in order to understand how each mechanism contributes to the void development process.

The main features of the void evolution observed experimentally have been recovered by the numerical simulations. This indicates that the implementation and the diffuse interface is a suitable method for describing the electromigration induced void growth process.

The first sample of simulations returned a TTF behavior (figure 8) adjustable to Black's equation format. Based on the literature concerning electromigration phenomena, it can be stated that the results obtained in this work suggest the validity of the method. It is expected that the diffuse interface method as its stated here can be used to evaluate all features of interconnect deterioration due to electromigration. The authors believe that any other physics pertinent to electromigration can

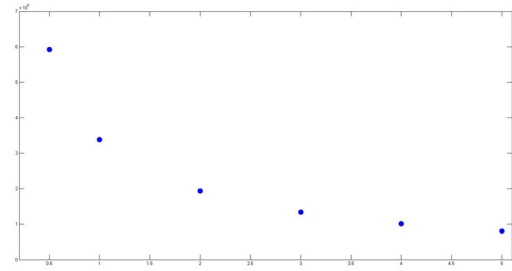


Fig. 8. TTF versus current density varying from  $0.5 j_0$  to  $5 j_0$ .

be included similarly in the method, for any geometry and all operation parameters among ICs.

## REFERENCES

- [1] De Orto, R. L., Hajdin Ceric, and Siegfried Selberherr. "Physically based models of electromigration: From Black's equation to modern TCAD models." *Microelectronics Reliability* 50.6 (2010): 775-789.
- [2] Cahn, John W., and John E. Hilliard. "Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy." *The Journal of chemical physics* 28.2 (1958): 258-267.
- [3] Bhate, Deepali N., Allan F. Bower, and Ashish Kumar. "A phase field model for failure in interconnect lines due to coupled diffusion mechanisms." *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 50.10 (2002): 2057-2083.
- [4] Lienig, Jens. "Electromigration and its impact on physical design in future technologies." *Proceedings of the 2013 ACM international symposium on International symposium on physical design*. ACM, 2013.
- [5] International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS), 2013.
- [6] Hauschildt, M., Gall, M., Thrasher, S., Justison, P., Michaelson, L., Hernandez, R., and Ho, P. S. (2006). Analysis of electromigration statistics for Cu interconnects. *Applied physics letters*, 88(21), 211907.
- [7] Yue, P., Zhou, C., Feng, J. J., Ollivier-Gooch, C. F., & Hu, H. H. (2006). Phase-field simulations of interfacial dynamics in viscoelastic fluids using finite elements with adaptive meshing. *Journal of Computational Physics*, 219(1), 47-67.
- [8] Mahadevan, M., & Bradley, R. M. (1999). Phase field model of surface electromigration in single crystal metal thin films. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 126(3), 201-213.
- [9] Xia, L., Bower, A. F., Suo, Z., & Shih, C. F. (1997). A finite element analysis of the motion and evolution of voids due to strain and electromigration induced surface diffusion. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 45(9), 1473-1493.
- [10] Wang, W., Suo, Z., & Hao, T. H. (1996). A simulation of electromigration-induced transgranular slits. *Journal of applied physics*, 79(5), 2394-2403.
- [11] Fridline, D. R., & Bower, A. F. (1999). Influence of anisotropic surface diffusivity on electromigration induced void migration and evolution. *Journal of applied physics*, 85(6), 3168-3174.
- [12] Butrymowicz, D. B., Manning, J. R., & Read, M. E. (1973). Diffusion in Copper and Copper Alloys. Part I. Volume and Surface Self-Diffusion in Copper. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 2(3), 643-656.